Linear Regression and Gradient Descent

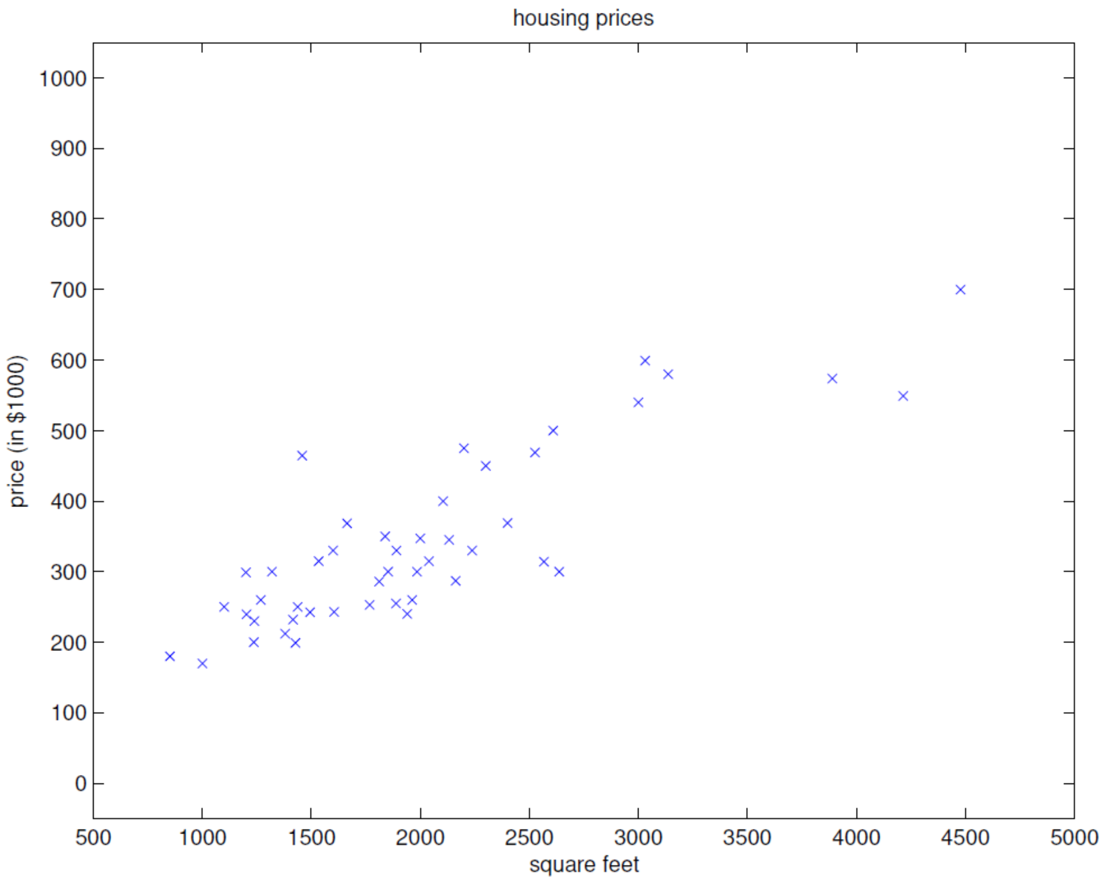
Supervised Learning

Supervised Learning의 예시를 보며 먼저 이해를 해보자.

아래와 같이 size-price Dataset이 존재한다고 치자.

Living area (feet^2)	Price (1000\$s)
2104	400
1600	330
2400	369
1416	232
3000	540
⋮	⋮

그리고 이를 ploting해서 아래 사진처럼 나타냈다.



위처럼 Dataset이 주어졌을 때, 어떻게 해야 size에 따른 price를 예측하는 모델을 만들 수 있는 가?

그전에... 아래와 같이 notation들을 정리하고 간다.

Notations

(i) : index. 오른쪽위에 나타나있는 거는 지수가 아니라 index를 의미함.

$x^{(i)}$: input variable $\leftrightarrow$ input features

$y^{(i)}$: output $\leftrightarrow$ target variable

$(x^{(i)},\ y^{(i)})$: training example

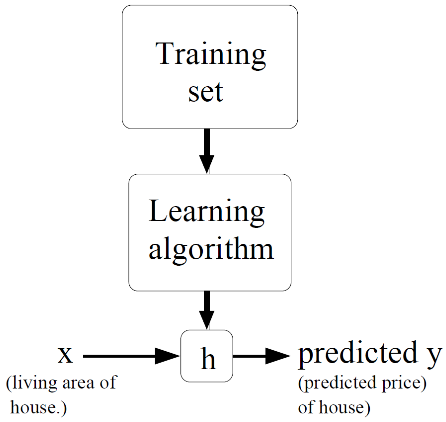
$\{(x^{(i)},\ y^{(i)}); i\ = 1, ..., n\}$: training set

$\mathcal{X}$: space of input values

$\mathcal{Y}$: space of output values

Supervised Learning Problem은 $h : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ 에서 input값에 대해서 output을 예측하는 "good" predictor $h(x)$를 만드는 것이다. 그리고 이는 **hypothesis(가설)**이라 불린다.

그림으로 나타내면 아래와 같다.



이때, target variable이 continuous하면 **regression problem**이라 하고, 몇 가지의 정확한 값들만 가지는 경우에는 **classficiation problem**이라 한다.

Part1. Linear Regression

위에서 소개한 문제에 대해서 input feature를 추가해보자. 아래와 같이 bedrooms의 개수도 인자값으로 추가되었다.

Living area (feet^2)	#bedrooms	Price (1000$s)
2104	3	400
1600	3	330
2400	3	369
1416	2	232
3000	4	540
⋮	⋮	⋮

위와 같은 경우에는 input이 2차원으로 변하였다.

이때, 다음과 같이 notation을 정의하자. *보통 더 일반적인 경우에는 아래보다 인자가 훨씬 많다.

$x_1^{(i)}$: living area of i-th house

$x_2^{(i)}$: number of bedrooms of i-th house

이제, Supervised Learning을 하기 위해서 h 함수를 정의해줄 것이다. 시초값은 아래와 같이 y가 x에 대해서 linear function이라 하자.

$$h_\theta(x) = \theta_0 \ + \theta_1 x_1 \ + \theta_2 x_2$$
$$h(x) = \sum_{i=0}^{d} \theta_i x_i \ = \theta^T x$$

- θ_i : **paramters**(또는 **weights**) $\leftrightarrow$ $\mathcal{X}$와 $\mathcal{Y}$를 공간으로 표현할 수 있게 연결해주는 매개변수 (혼동되지 않는 선에서 생략가능하다.)
- x_0은 1이라 가정하자.
- $\theta^T x$에서 θ와 x는 모두 vector이다.

이제 θ값을 어떻게 선택할 것인가? 이때, 가장 일리있는 것은 hypothesis h가 y와 비슷하게 만들어주는 것이다. 그래서 h가 y와 비슷한 값을 가지도록 만들어 줄 것인데, 이때 계산을 위해 **cost function** 하자.

Cost function은 $h_\theta(x^{(i)})$와 $(y^{(i)})$사이 거리가 얼마나 가까운지 값으로 나타내기 위한 것으로 아래와 같이 정의하였다.

$$J(\theta) \ = \ \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(h_\theta(x^{(i)}) - (y^{(i)}))^2$$

위 식은 **ordinary least squares로도 알려져 있다.

이제 이 값을 최소화를 하게 만드는 hypothesis h를 구해보도록 하자.

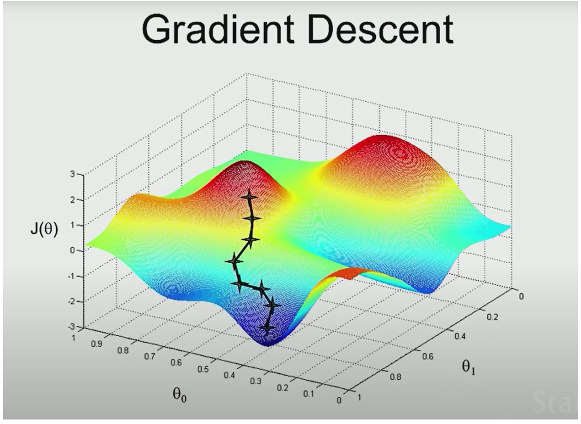
---

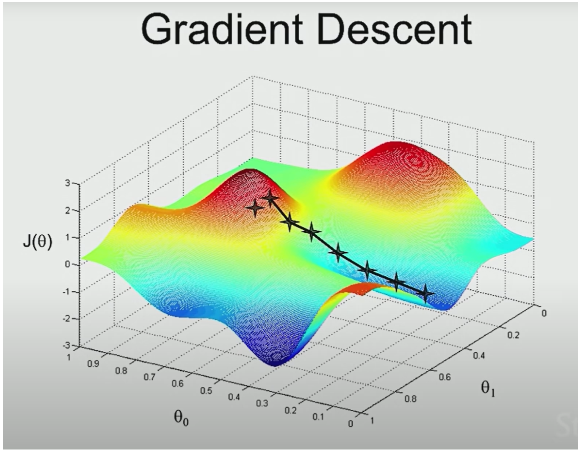
1 LMS Algorithm

θ를 적당히 잘 골라서 $J(\theta)$의 값을 최소화시켜보자.

이를 위해서 **gradient descent**라 불리는 알고리즘을 필요로 한다. 이는 특정 초기 θ값으로 시작을 해서, 계속해서 $J(\theta)$의 값을 줄여나가는 방법이다. 이는 각 지점에서 가장 기울기가 낮은 방향으로 진행을 하는 것이다.

아래 사진을 보면, 각 지점에서 위에서 봤을 때 가장 기울기가 낮은곳으로 이동을 하여, 이 과정을 반복하면 local하게 가장 낮은 곳으로 도달 할 수 있다는 것이다.





하지만, 입력값에 따라 위처럼 다른 결론에 도달할 수 있다.

gradient descent algorithm 을 고려하면...

update :

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta)$$

- 위와 같이 update를 정의할 수 있다. 이는 주어진 θ에서 다음 θ로 이동하기 위한 식이다.
- j는 0,1,2,...n
- α 는 learning rate이다.

가장 심플한 경우를 생각해보자. training example로 (x, y)가 주어졌으면 아래와 같이 편미분을 처리할 수 있다.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) &= \frac{\partial}{\partial \theta_j} \frac{1}{2} (h_\theta(x) - y)^2 \\
&= 2 * \frac{1}{2} (h_\theta(x) - y) \ * \ \frac{\partial}{\partial \theta_j} (h_\theta(x) - y) \\
&= (h_\theta(x) - y) * \frac{\partial}{\partial \theta_j} \left(\sum_{i=0}^{d} \theta_i x_i - y \right) \\
&= (h_\theta(x) - y) x_j
\end{aligned}
$$

즉, update rule이 아래와 같이 바뀐다.

$$\theta_j := \theta_j + \alpha (y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)})) x_j^{(i)}$$

위 rule을 **LMS(least mean squares) update rule** (또는 **Widrow-Hoff**)이라 한다. 현재 위 식은 single training example에 대해서만 일반화한 것이다. 그래서 이를 여러개의 example에 대해서도 일반화를 하면 아래와 같이 2가지 방법으로 식을 정의할 수 있다.

(1)

$$
\begin{aligned}
&\text{Repeat until convergence } \{ \\
&\theta_j := \theta_j + \alpha \sum_{i=1}^{n} (y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)})) x_j^{(i)}, \ \text{(for every j)} \\
&\}
\end{aligned}
$$

첫번째 식은 위와 같이 나타낼 수 있다. 이를 모두 벡터로 다시 표현하면

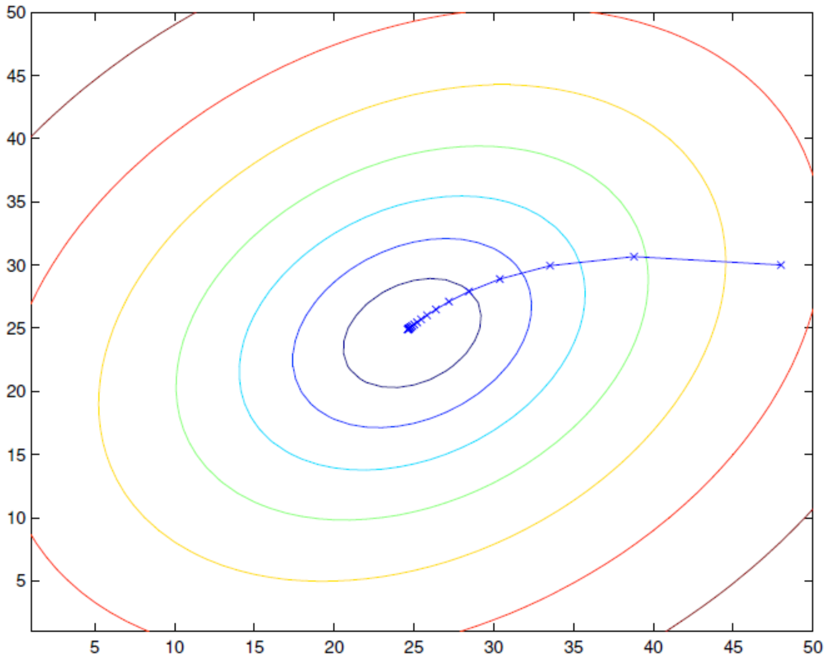
$$\theta := \theta + \alpha \sum_{i=1}^{n} (y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)})) x^{(i)}$$

위와 같이 표현 가능하다.

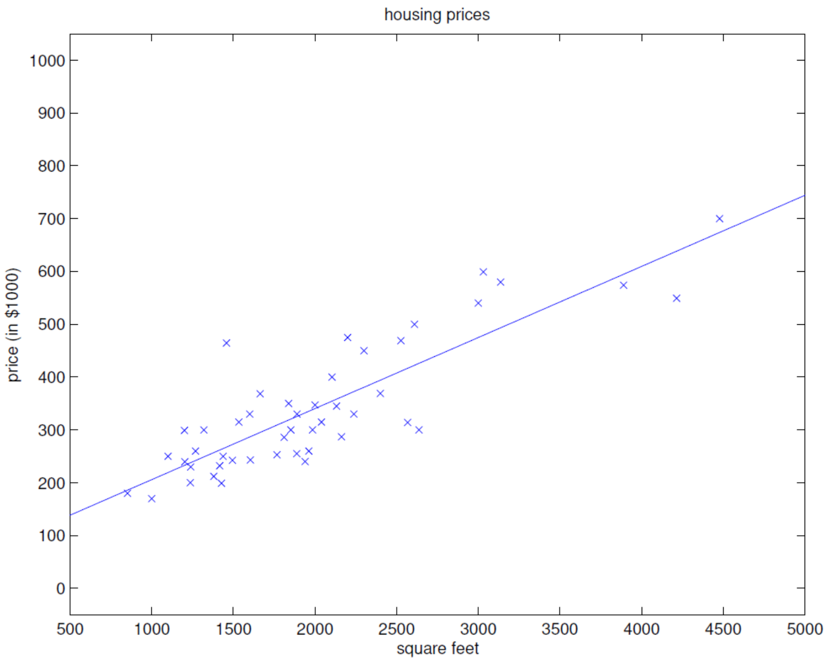
그러면 이제 위에서 summation하는 부분은 $\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_j}$임을 알 수 있다. 즉, Cost function의 simply gradient descent이다. 이는 training set의 모든 example, 모든 step에 대해서 행해지고, 이를 보고 **batch gradient descent**라 한다.

** 대부분의 optimization problem의 경우 보통 only one global optima를 갖는다. 즉, local하게 다른 optima가 생기는 경우는 고려하지 않아도 된다.

실제로 J는 볼록 2차함수이다. 그리고 아래 사진은 이 방법을 이용해서 2차함수의 최솟값을 구하는 과정을 나타낸 것이다.



그리고, 처음 주어졌던 주택 문제에 대해서 batch gradient descent 방법을 이용해 θ를 구하게 되면 아래와 같이 $h_\theta(x)$를 구할 수 있게 된다.



---

(2)

$$
\begin{aligned}
&\text{Loop } \{ \\
&\qquad \text{for i=1 to n, } \{ \\
&\qquad\quad \theta_j := \theta_j + \alpha(y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)}))x_j^{(i)}, \text{ (for every j)} \\
&\qquad \} \\
&\}
\end{aligned}
$$

두 번째 식은 위와 같이 나타낼 수 있다. 이를 모두 벡터로 나타내면

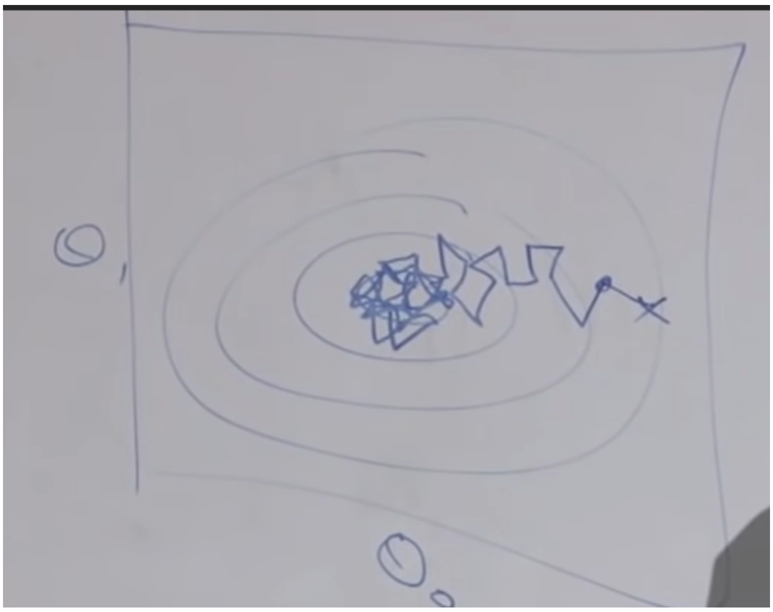
$$\theta := \theta + \alpha(y^{(i)} - h_\theta(x^{(i)}))x^{(i)}$$

핵심적인 부분이 위와 같이 변화한다.

위 알고리즘은 모든 traininng set과 그에 속하는 example들에 대해서 위 update를 적용하고 parameter를 변화시키게 된다. (1)과의 차별점으로는 (1)에서는 모든 feature에 대해서 한번에 처리를 하게 되고, (2)는 각각 따로 처리를 하게 된다. 그래서 각 example에 대해서 바로바로 run을 할 수 있다.

이런 방법을 보고, **stochastic gradient descent (또는 incremental gradient descent)** 라 한다

일반적으로 stochastic gradient descent가 batch gradient descent에 비해 훨씬 빠르게 minimum 값에 가까운 θ를 찾아내게 된다. 하지만, 정확히 minimum한 θ를 찾아내는 것은 아니라는 단점이 있다. (아래 사진 처럼 optima 주변에서 계속해서 진동을 하게 될 것임.)



하지만, minimum에 가까운 θ값은 보통은 거의 minimum에 가깝고, **의미 있는 데이터임과 동시에 훨씬 빠른 속도를 보여주기에 training set이 큰 경우에는 batch gradient descent보다 stochastic gradient descent가 선호된다.**

---

2 The normal equations

lms 알고리즘 말고 cost function J의 값을 최소화 하는 방법이 있다.

이는 derivatives(미분)을 이용하는 것이다.

2.1. Matrix derivatives

본격적으로 설명하기전, 행렬 미분에 대해 이야기 하고 넘어가도록 하자.

$f\ :\ \mathbb{R}^{n\times d}\ \rightarrow \mathbb{R}$ 는 n x d 실수 행렬이고, A에 대한 미분은 다음과 같이 나타낸다.

$$\nabla_A f(A) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial A_{11}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial A_{1d}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial A_{n1}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial A_{nd}} \end{bmatrix}$$

2.2 Least squares revisited

matrix derivatives를 이용해서 $J(\theta)$를 최소화시키는 θ를 찾아보도록 하겠다.

먼저, $J(\theta)$**를 matrix-vertorial notation형태**로 쓰는걸로 시작한다.

주어진 Training set에 대해서 **design matrix** X를 다음과 같이 정의하자.

$$X\ \ = \begin{bmatrix} —(x^{(1)})^T— \\ —(x^{(2)})^T— \\ \vdots \\ —(x^{(n)})^T— \end{bmatrix}$$

** X는 n-by-d matrix이고, 각각의 training examples의 input values를 row로 가지고 있다.

동시에, $\vec{y}$를 다음과 같이 정의한다.

$$\vec{y} = \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{bmatrix}$$

**각각의 row는 target values로 이루어져 있다.

이때, $h_\theta(x^{(i)}) = (x^{(i)})^T\theta$이기에 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$\begin{aligned} X\theta \ - \vec{y} \ &= \begin{bmatrix} (x^{(1)})^T\theta \\ \vdots \\ (x^{(n)})^T\theta \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} y^{(1)} \\ \vdots \\ y^{(n)} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} h_\theta(x^{(1)}) - y^{(1)} \\ \vdots \\ h_\theta(x^{(n)}) - y^{(n)} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

이때, 주어진 vector z에 대해서 $z^Tz \ = \ \sum_i z_i^2$ 라는 사실을 이용하면,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(X\theta - \vec{y})^T(X\theta - \vec{y}) &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \\ &= J(\theta) \end{aligned}$$

위와 같이 $J(\theta)$를 표현할 수 있게 된다.

그래서, 이제 J의 값을 최소화 시키기 위해서, θ에 대한 미분값을 구해보자.

$$\begin{aligned} \nabla_\theta J(\theta) &= \nabla_\theta \frac{1}{2}(X\theta - \vec{y})^T(X\theta - \vec{y}) \\ &= \frac{1}{2}\nabla_\theta((X\theta)^TX\theta - (X\theta)^T\vec{y} - \vec{y}^T(X\theta) + \vec{y}^T\vec{y}) \\ &= \frac{1}{2}\nabla_\theta(\theta^T(X^TX)\theta - \vec{y}^T(X\theta) - \vec{y}(X\theta)) \\ &= \frac{1}{2}\nabla_\theta(\theta^T(X^TX)\theta - 2(X^T\vec{y})^T\theta) \\ &= \frac{1}{2}(2X^TX\theta - 2X^T\vec{y}) \\ &= X^TX\theta - X^T\vec{y} \end{aligned}$$

**세번째 줄에서 $a^Tb = b^Ta$란 사실을 이용했음.

***5번째 줄에서 $\nabla_x b^Tx = b$, $\nabla_x x^TAx = 2Ax$ for symmetric matrix A란 사실을 이용함

그래서 J를 최소화 시키려면 미분값이 0인 부분을 찾아야 한다. 이때, 이를 만족하게 해주는 식인 다음 식을 **normal equations** 라 한다.

$$X^T X\theta = X^T \vec{y}$$

그래서, 이를 정리하면, $J(\theta)$를 최소로 하는 θ는 다음과 같다.

$$\theta = (X^T X)^{-1} X^T \vec{y}$$ [3]