

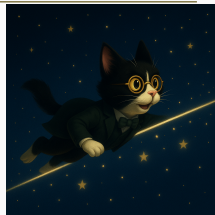
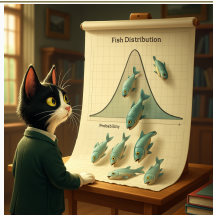
ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

18 сентября 2025 г.

Random facts:



- 18 сентября 1066 г. Гаральд Гардерада вместе с Тостигом Годвинсоном высадились в устье реки Хамбер; через два дня он разгромил английские войска в битве у Фулфорда, но через пять дней потерпел сокрушительное поражение при Стэмфорд-Бридж
- 18 сентября 1698 г. в Бастилию был переведён таинственный узник под номером 64489001, известный как «Железная маска»; после его смерти в 1703 г. всю мебель и одежду специально уничтожили, закрасив стены и расплавив все металлические вещи
- 18 сентября 1830 г. лошадь победила в гонке на 9 миль от Райлиз Таверн до Балтимора между лошадью и первым американским паровозом, а 18 сентября 1893 г. было завершено строительство Великой Северной железной дороги между Миссисипи и Тихим океаном
- 18 сентября 1870 г. Генри Уошберн открыл гейзер Old Faithful, который впоследствии стал источником одного из самых известных датасетов для кластеризации
- 18 сентября 1886 г. поэт Жан Мореас опубликовал в газете «Фигаро» статью, ставшую манифестом литераторов-символистов; сами термины «символист» и «символизм» были предложены для замены слова «декадент», которую раньше применяли критики для Бодлера и Малларме

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

- Линейная регрессия: рассмотрим линейную функцию

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^p x_j w_j = \mathbf{x}^\top \mathbf{w}, \quad \mathbf{x} = (1, x_1, \dots, x_p).$$

- Таким образом, по вектору входов $\mathbf{x}^\top = (x_1, \dots, x_p)$ мы будем предсказывать выход y как

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \hat{w}_0 + \sum_{j=1}^p x_j \hat{w}_j = \mathbf{x}^\top \hat{\mathbf{w}}.$$

- Как найти оптимальные параметры $\hat{\mathbf{w}}$ по тренировочным данным вида $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1}^N$?
- Метод наименьших квадратов: будем минимизировать

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^N (y_i - \mathbf{x}_i^\top \mathbf{w})^2.$$

- Как минимизировать?

- Можно на самом деле решить задачу точно – записать как

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}),$$

где $\mathbf{X}$ – матрица $N \times p$, продифференцировать по $\mathbf{w}$, получится

$$\hat{\mathbf{w}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y},$$

если матрица $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ невырожденная.

- Замечание: $(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$ называется *псевдообратной матрицей Мура–Пенроуза* (Moore–Penrose pseudo-inverse) матрицы $\mathbf{X}$; это обобщение понятия обратной матрицы на неквадратные матрицы.
- Много ли нужно точек, чтобы обучить такую модель?

- Теперь давайте поговорим о линейной регрессии по-байесовски.
- Основное наше предположение – в том, что шум (ошибка в данных) распределён нормально, т.е. переменная t , которую мы наблюдаем, получается как

$$t = y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) + \epsilon, \quad \epsilon \sim N(0, \sigma^2).$$

Иными словами,

$$p(t \mid \mathbf{x}, \mathbf{w}, \sigma^2) = N(t \mid y(\mathbf{x}, \mathbf{w}), \sigma^2).$$

- Здесь пока y – любая функция.

- Чтобы не повторять совсем уж то же самое, мы рассмотрим не в точности линейную регрессию, а её естественное обобщение – линейную модель с базисными функциями:

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^{M-1} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

(M параметров, $M - 1$ базисная функция, $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$).

- Базисные функции ϕ_i – это, например:
 - результат feature extraction;
 - расширение линейной модели на нелинейные зависимости (например, $\phi_j(x) = x^j$);
 - локальные функции, которые существенно не равны нулю только в небольшой области (например, гауссовские базисные функции $\phi_j(\mathbf{x}) = e^{-\frac{(x-\mu_j)^2}{2s^2}}$);
 - ...

- Рассмотрим набор данных $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ со значениями $\mathbf{t} = \{t_1, \dots, t_N\}$.
- Будем предполагать, что данные взяты независимо по одному и тому же распределению:

$$p(\mathbf{t} \mid \mathbf{X}, \mathbf{w}, \sigma^2) = \prod_{n=1}^N N(t_n \mid \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n), \sigma^2).$$

- Прологарифмируем (опустим $\mathbf{X}$, т.к. по нему всегда условная вероятность будет):

$$\ln p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}, \sigma^2) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{n=1}^N (t_n - \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n))^2.$$

- Прологарифмируем (опустим $\mathbf{X}$, т.к. по нему всегда условная вероятность будет):

$$\ln p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}, \sigma^2) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{n=1}^N (t_n - \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n))^2.$$

- И вот мы получили, что для максимизации правдоподобия по $\mathbf{w}$ нам нужно как раз минимизировать среднеквадратичную ошибку!

$$\nabla_{\mathbf{w}} \ln p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^N (t_n - \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}_n)) \phi(\mathbf{x}_n).$$

- Решая систему уравнений $\nabla \ln p(\mathbf{t} \mid \mathbf{w}, \sigma^2) = 0$, получаем то же самое, что и раньше:

$$\mathbf{w}_{ML} = (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top \mathbf{t}.$$

- Здесь $\Phi = (\phi_j(\mathbf{x}_i))_{i,j}$.

- Теперь можно и относительно σ^2 максимизировать правдоподобие; получим

$$\sigma_{ML}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (t_n - \mathbf{w}_{ML}^\top \phi(\mathbf{x}_n))^2,$$

т.е. как раз выборочная дисперсия имеющихся данных вокруг предсказанного значения.

ПРИМЕР: ПОЛИНОМИАЛЬНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

- Мы говорили о регрессии с базисными функциями:

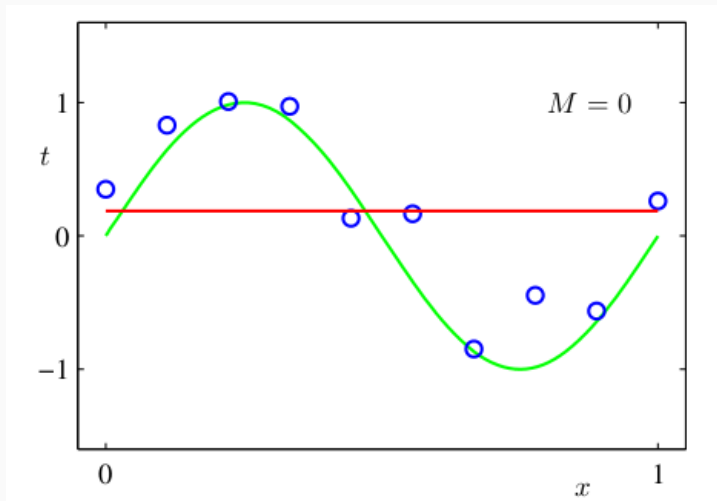
$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^M w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}).$$

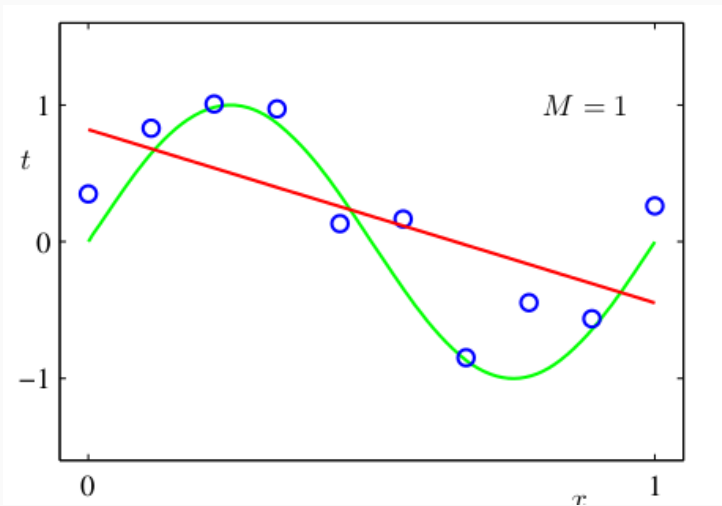
- Давайте для примера рассмотрим такую регрессию для $\phi_j(x) = x^j$, т.е.

$$f(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \dots + w_M x^M.$$

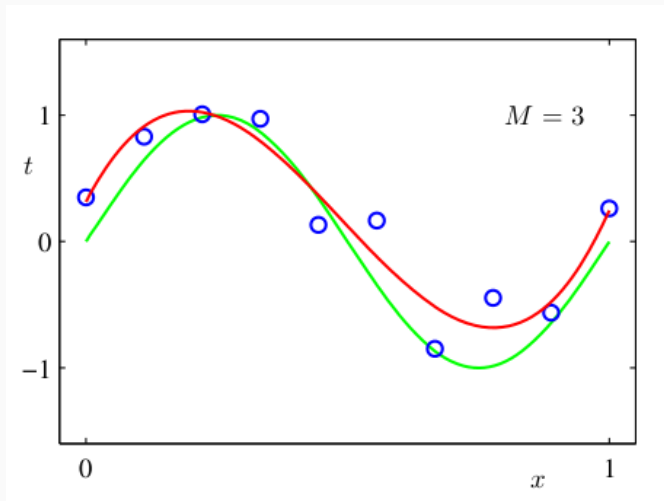
- И будем, как раньше, минимизировать квадратичную ошибку.
- Пример с кодом.

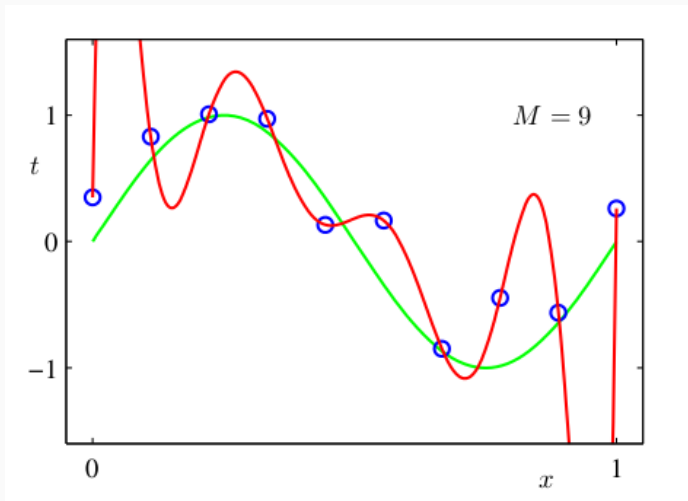
Полиномиальная аппроксимация

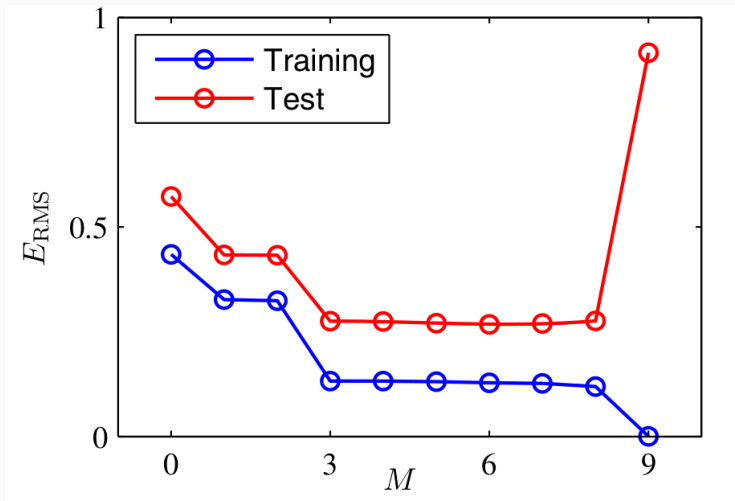




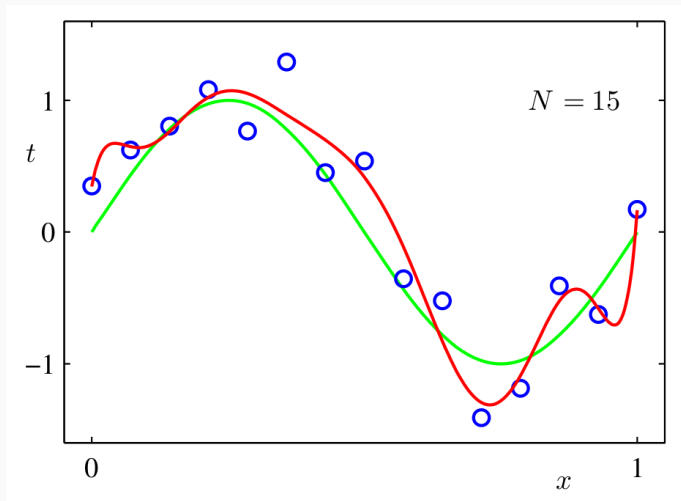
Полиномиальная аппроксимация



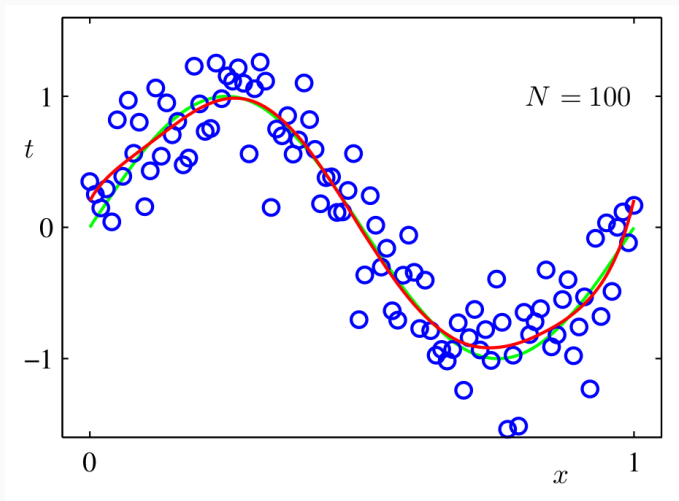




МОЖНО СОБРАТЬ БОЛЬШЕ ДАННЫХ...



МОЖНО СОБРАТЬ БОЛЬШЕ ДАННЫХ...



ЗНАЧЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ

	$M = 0$	$M = 1$	$M = 6$	$M = 9$
w_0^*	0.19	0.82	0.31	0.35
w_1^*		-1.27	7.99	232.37
w_2^*			-25.43	-5321.83
w_3^*			17.37	48568.31
w_4^*				-231639.30
w_5^*				640042.26
w_6^*				-1061800.52
w_7^*				1042400.18
w_8^*				-557682.99
w_9^*				125201.43

СПАСИБО!

Спасибо за внимание!

