

ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург

29 сентября 2023 г.

Random facts:

- 29 сентября 1818 г. открылся Ахенский конгресс, на котором державы-победители решали, что делать с Францией; в итоге Францию приняли в Священный союз, определили сроки вывода войск союзников и оставшуюся контрибуцию; Версаль не получилось, Франция спокойно интегрировалась обратно в европейское сообщество
- 29 сентября 1820 г. Франсиско Рамирес основал Республику Энтре-Риос («Междуречье»), полунезависимое государство в составе Соединённых провинций Рио-де-ла-Платы, которое было распущено через год, сразу после смерти Рамиреса; вскоре и сами Соединённые провинции частично образовали Уругвай, а частично были распределены между Аргентиной, Бразилией и Боливией
- 29 сентября 1897 г. в Буэнос-Айресе, в театре «Олимпо», на премьере спектакля «Креольский суд» было впервые исполнено танго
- 29 сентября 1916 г. Джон Рокфеллер, основатель «Standard Oil», стал первым в мире бизнесменом-миллиардером
- 29 сентября 1922 г. отплыл «Обербургомистр Хакен», ставший известным как «Философский пароход»; на борту были Бердяев, Франк, Ильин, Трубецкой, Вышеславцев, Кизеветтер и многие другие

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:

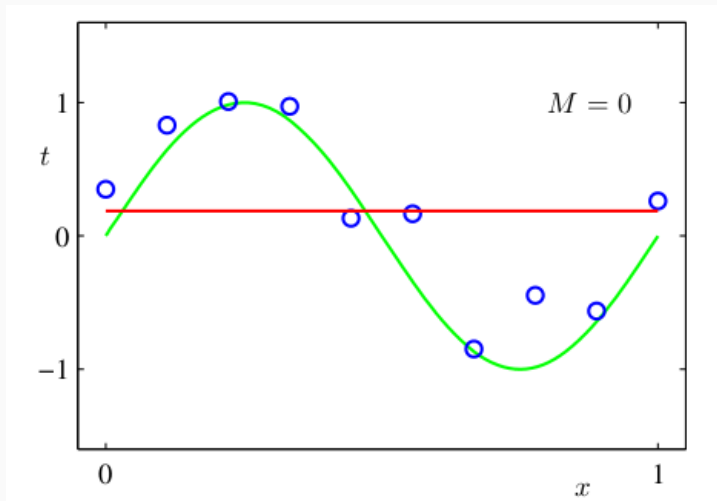
$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^M w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}).$$

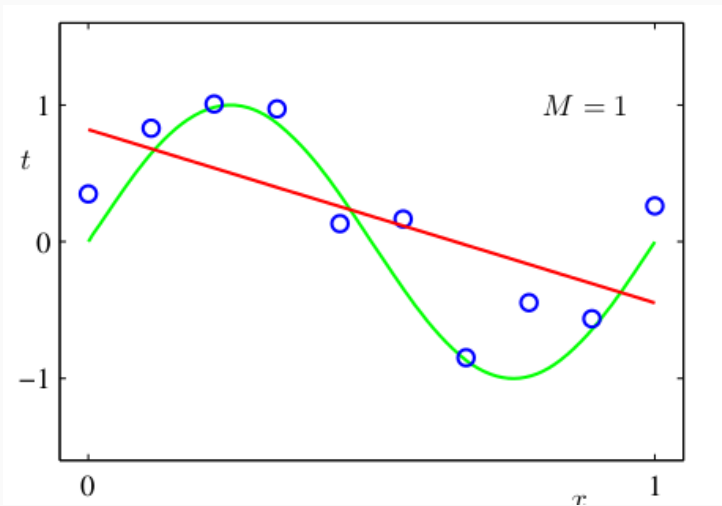
- Давайте для примера рассмотрим такую регрессию для $\phi_j(x) = x^j$, т.е.

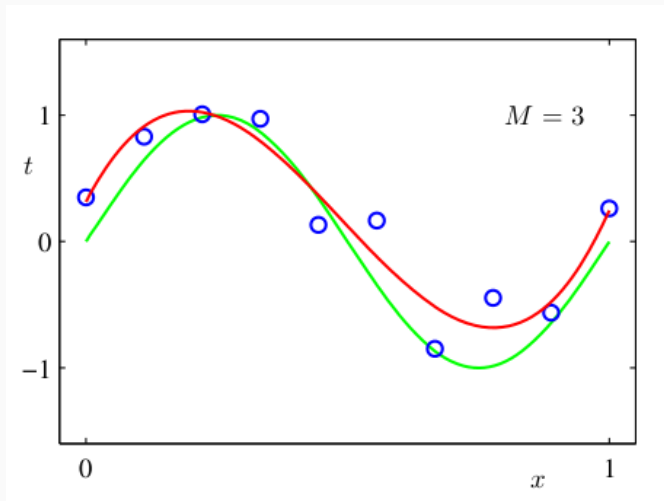
$$f(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \dots + w_M x^M.$$

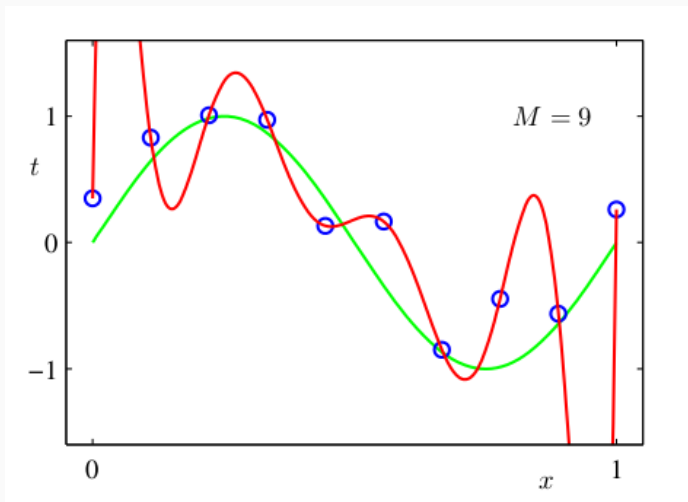
- И будем, как раньше, минимизировать квадратичную ошибку.
- Пример с кодом.

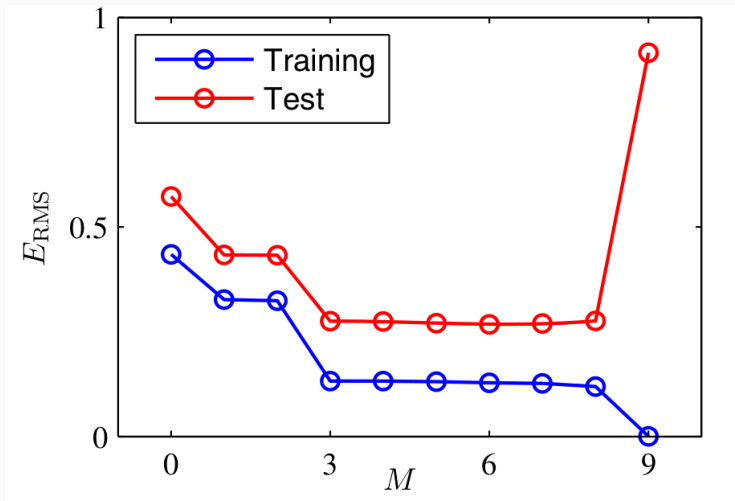
Полиномиальная аппроксимация

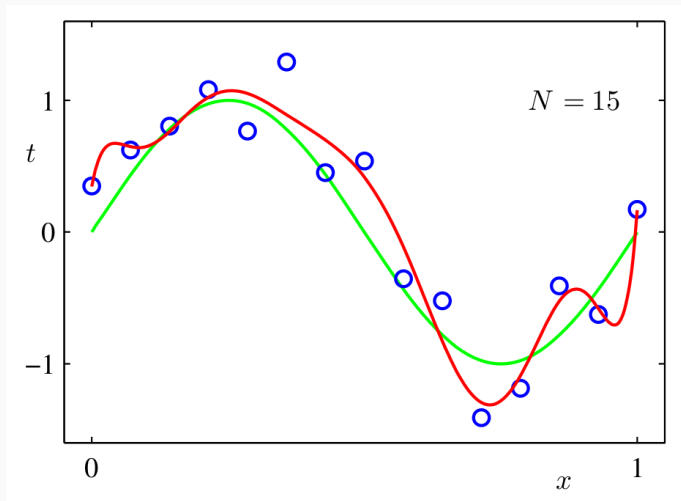




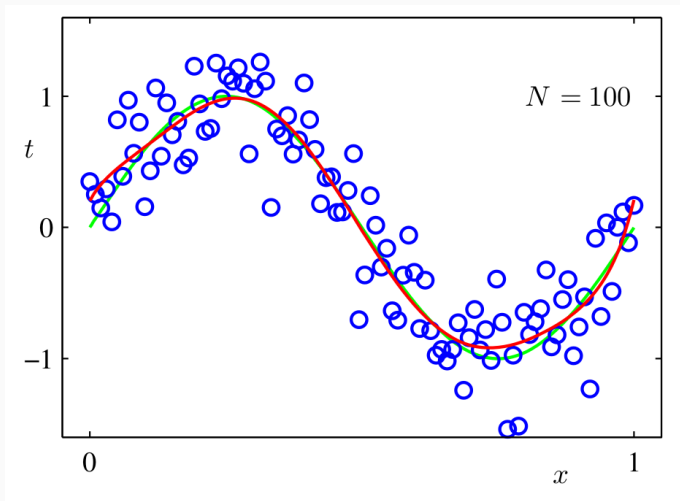








МОЖНО СОБРАТЬ БОЛЬШЕ ДАННЫХ...



	$M = 0$	$M = 1$	$M = 6$	$M = 9$
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

- Итак, получается, что у нас сильно растут коэффициенты.
- Давайте попробуем с этим бороться. Бороться будем прямолинейно и простодушно: возьмём и добавим размер коэффициентов в функцию ошибки.

- Было (для тестовых примеров $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$):

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2.$$

- Стало:

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{w}\|^2,$$

где α – коэффициент регуляризации (его надо будет как-нибудь выбрать).

- Как оптимизировать эту функцию ошибки?

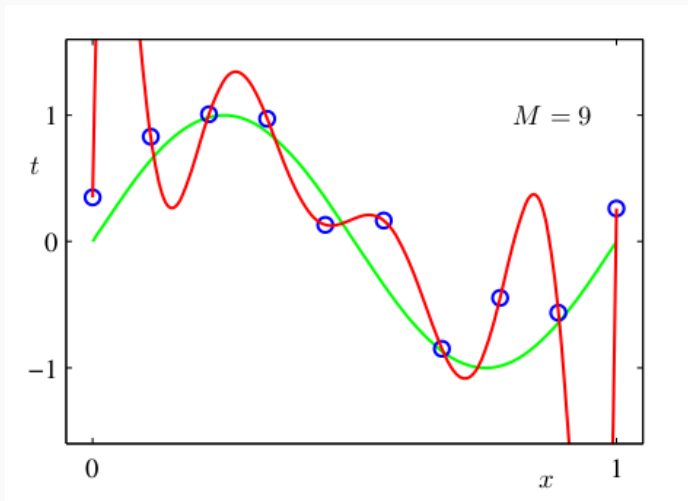
- Да точно так же – запишем как

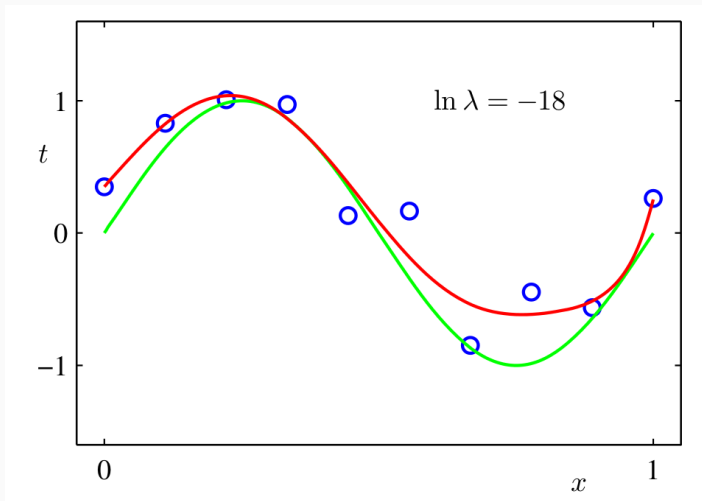
$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{w}) + \frac{\alpha}{2} \mathbf{w}^\top \mathbf{w}$$

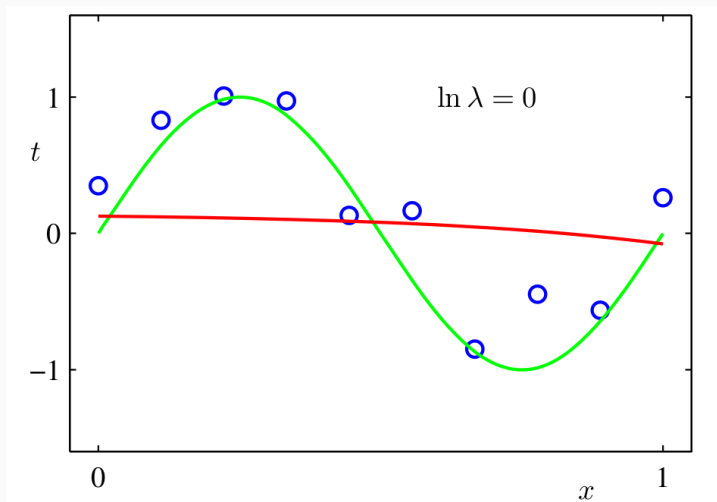
и возьмём производную; получится

$$\mathbf{w}^* = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \alpha \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

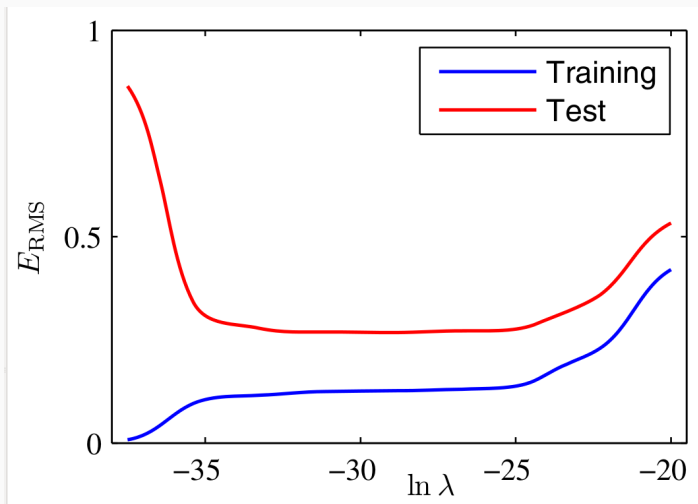
- Это *гребневая регрессия* (ridge regression); кстати, добавление $\alpha \mathbf{I}$ к матрице неполного ранга делает её обратимой; это и есть *регуляризация*, и это и было исходной мотивацией для гребневой регрессии.







	$\ln \lambda = -\infty$	$\ln \lambda = -18$	$\ln \lambda = 0$
w_0^*	0.35	0.35	0.13
w_1^*	232.37	4.74	-0.05
w_2^*	-5321.83	-0.77	-0.06
w_3^*	48568.31	-31.97	-0.05
w_4^*	-231639.30	-3.89	-0.03
w_5^*	640042.26	55.28	-0.02
w_6^*	-1061800.52	41.32	-0.01
w_7^*	1042400.18	-45.95	-0.00
w_8^*	-557682.99	-91.53	0.00
w_9^*	125201.43	72.68	0.01



- Почему именно так? Почему именно $\frac{\alpha}{2} \|\mathbf{w}\|^2$?
- Мы сейчас ответим на этот вопрос, но, вообще говоря, это не обязательно.
- Лассо-регрессия (lasso regression) регуляризует L_1 -нормой, а не L_2 :

$$\text{RSS}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 + \alpha \sum_{j=0}^M |w_j|.$$

- Есть и другие типы; об этом будем говорить позже.

Спасибо за внимание!