ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ II И ГАУССИАНЫ

Сергей Николенко

СПбГУ — Санкт-Петербург
5 октября 2019 г.

Random facts:

- 5 октября — Всемирный день учителей ООН и День работников уголовного розыска России; именно 5 октября 1918 года НКВД РСФСР создал Центророзыск
- 5 октября — день памяти Мурдока Кульдея, последнего из бардов, который жил возле озера в Аргильшире и почитается как отшельник католической церкви
- 5 октября 1921 г. в Лондоне по инициативе Кэтрин Доусон-Скотт и Джона Голсуорси был учреждён ПЕН-клуб (от слов poet, essayist и novelist)
- 5 октября 1962 г. в Великобритании вышел Love Me Do, первый сингл the Beatles
- 5 октября 1969 г. на BBC вышел первый выпуск Monty Python's Flying Circus

Предсказания в линейной регрессии

Предсказание в линейной регрессии

- Теперь давайте вернёмся к байесовской постановке:
  1. найти апостериорное распределение на гипотезах/параметрах:

$$p(\theta \mid D) \propto p(D|\theta)p(\theta)$$

     (и/или найти максимальную апостериорную гипотезу $\arg\max_\theta p(\theta \mid D)$);
  2. найти апостериорное распределение исходов дальнейших экспериментов:

$$p(x \mid D) \propto \int_{\theta \in \Theta} p(x \mid \theta)p(D|\theta)p(\theta)\mathrm{d}\theta.$$

Предсказание в линейной регрессии

- В прошлый раз мы нашли апостериорное распределение: для гауссовского априорного

$$p(\mathbf{w} \mid \alpha) = N(\mathbf{w} \mid 0, \frac{1}{\alpha}\mathbf{I})$$

мы нашли

$$\begin{aligned} p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) &= N(\mathbf{w} \mid \mu_N, \Sigma_N), \\ \mu_N &= \Sigma_N \left(\Sigma_0^{-1}\mu_0 + \beta\Phi^\top \mathbf{t}\right), \\ \Sigma_N &= \left(\Sigma_0^{-1} + \beta\Phi^\top\Phi\right)^{-1}, \end{aligned}$$

где $\beta = \frac{1}{\sigma^2}$ (precision нормального распределения).

Предсказание в линейной регрессии

- Теперь сделаем следующий шаг – найдём апостериорное распределение наших предсказаний

$$p(t \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) = \int p(t \mid \mathbf{w}, \beta) p(\mathbf{w} \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) d\mathbf{w}.$$

- Это свёртка двух гауссианов, и получается...

Предсказание в линейной регрессии

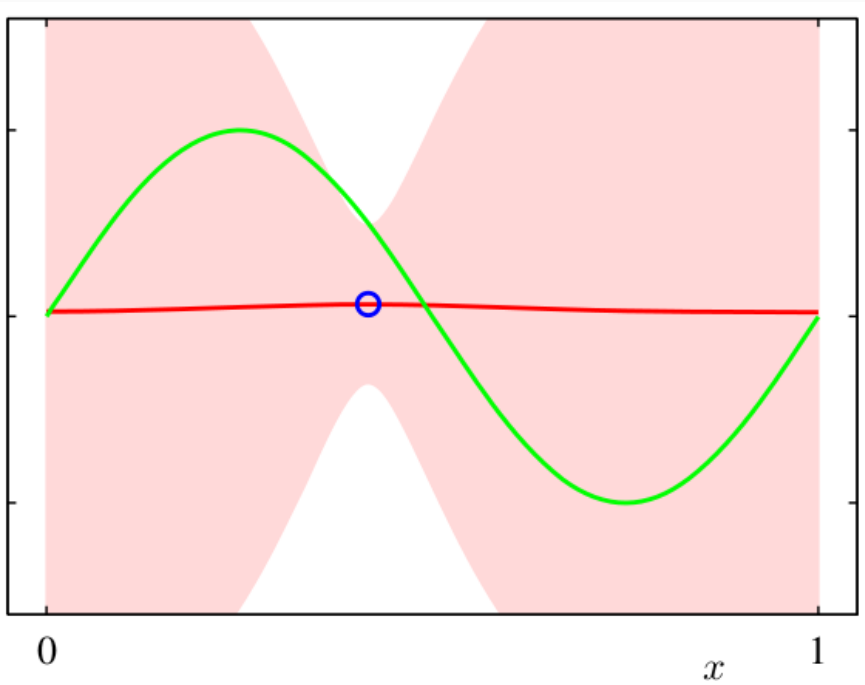
- ...тоже гауссиан:

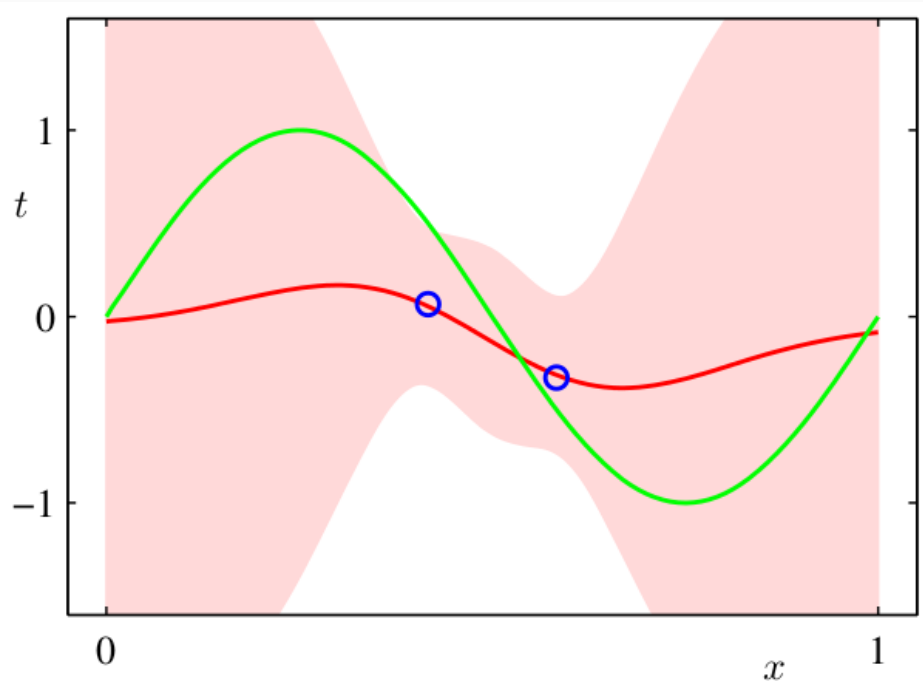
$$p(t \mid \mathbf{t}, \alpha, \beta) = N(t \mid \mu_N^\top \phi(\mathbf{x}), \sigma_N^2),$$
$$\text{где } \sigma_N^2 = \frac{1}{\beta} + \phi(\mathbf{x})^\top \Sigma_N \phi(\mathbf{x}).$$

- Т.е. дисперсия складывается из шума в данных β и дисперсии параметров $\mathbf{w}$; гауссианы независимы, и их дисперсии просто складываются.

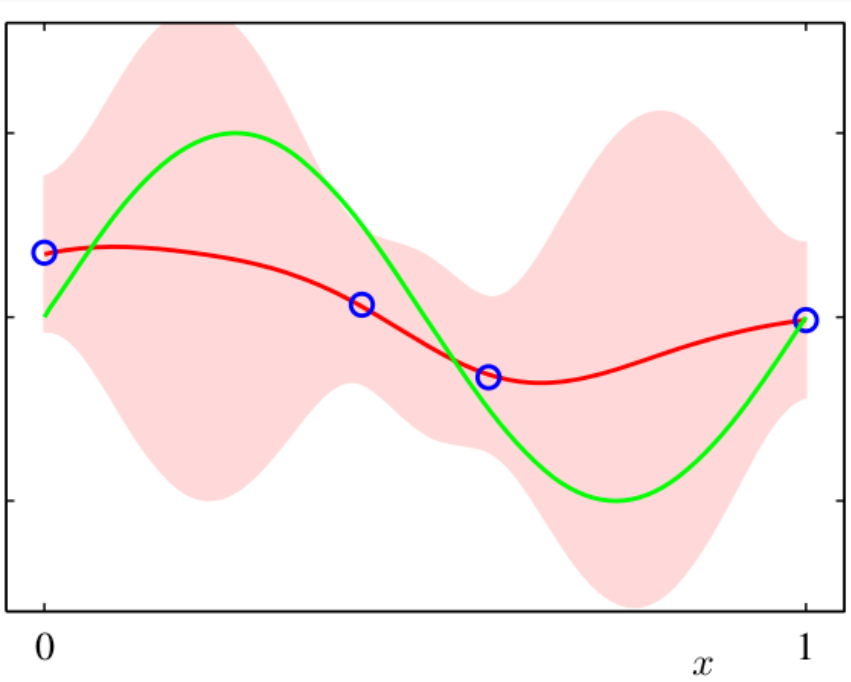
Упражнение. Оценка всё время уточняется: $\sigma_{N+1}^2 \leq \sigma_N^2$.

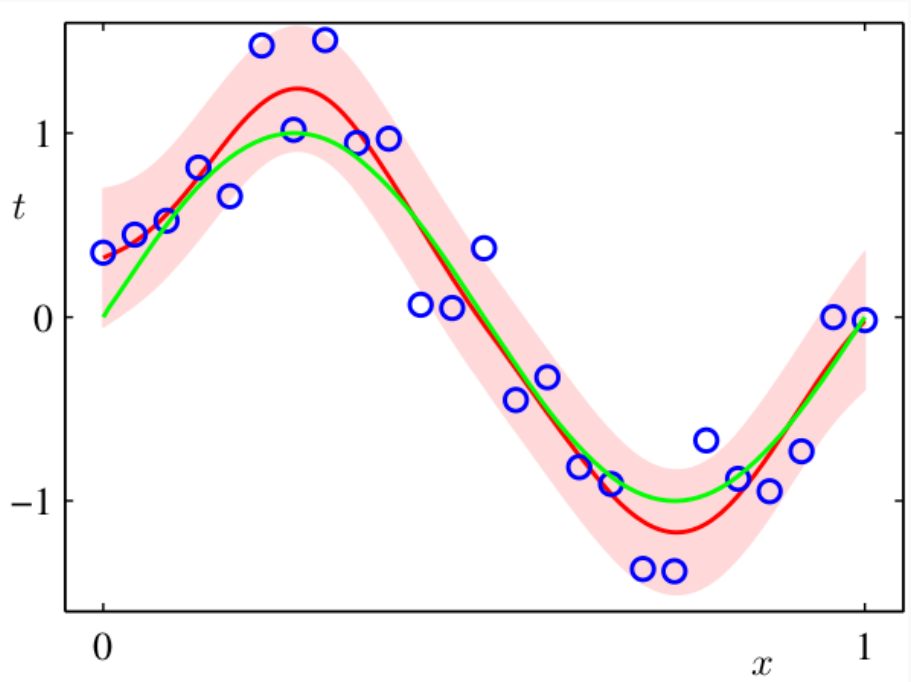
Предсказания



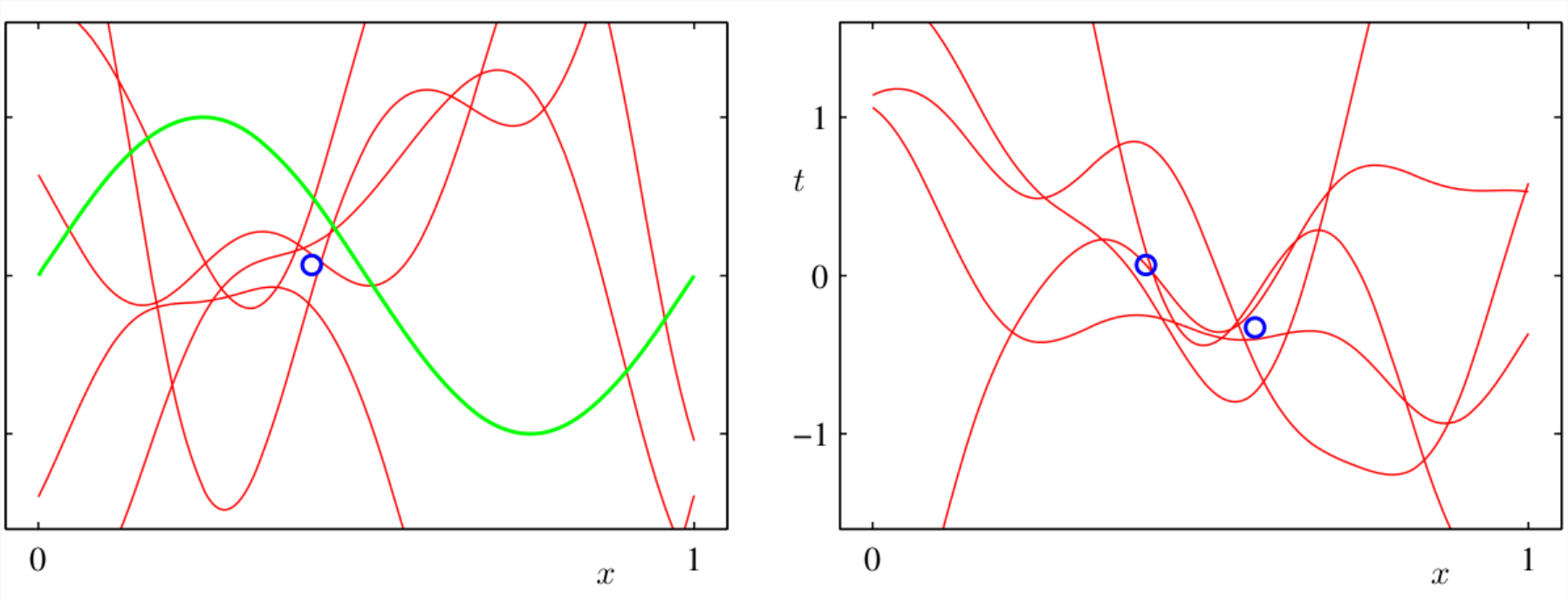


Предсказания

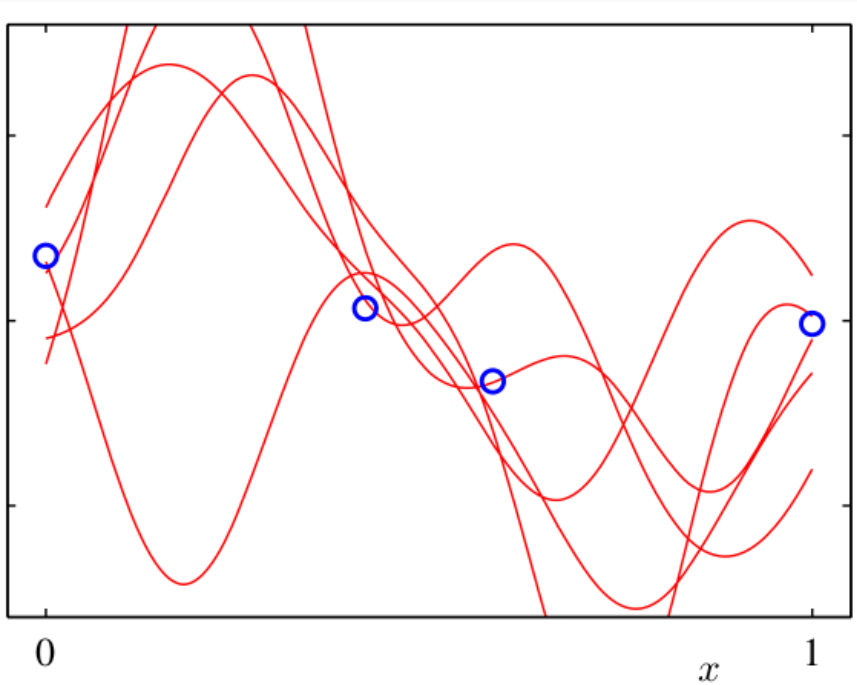


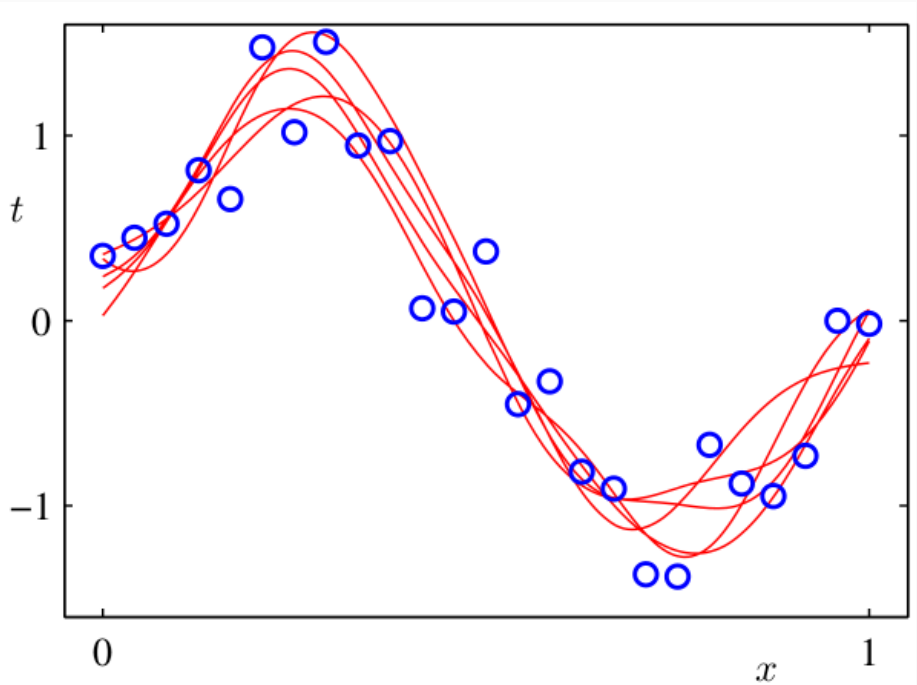


Предсказания



Предсказания





Байесовский вывод для гауссиана

Нормальное распределение: фиксируем σ

- На самом деле всё это — байесовский вывод для нормального распределения:

$$p(x_1, \dots, x_n \mid \mu, \sigma^2) \propto \frac{1}{\sigma^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_i (x_i - \mu)^2\right).$$

- Хотим: найти сопряжённое априорное распределение, подсчитать правдоподобие, решить задачу предсказания.
- Для начала зафиксируем σ^2 и будем в качестве параметра рассматривать только μ.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Сопряжённое априорное распределение для μ при фиксированном σ^2 тоже нормальное и выглядит как

$$p(\mu \mid \mu_0, \sigma_0^2) \propto \frac{1}{\sigma_0^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_0^2}(\mu - \mu_0)^2\right).$$

- Обычно выбирают $\mu_0 = 0$, $\sigma_0^2 \to \infty$ (порой буквально).
- Давайте рассмотрим сначала случай ровно одного наблюдения x и найдём $p(\mu \mid x)$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- При нашем априорном распределении у μ и x совместное нормальное распределение:

$$x = \mu + \sigma\epsilon, \quad \mu = \mu_0 + \sigma_0\delta, \quad \epsilon, \delta \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

Упражнение. Пусть (z_1, z_2) – случайные величины с совместным нормальным распределением. Докажите, что случайная величина $z_1 \mid z_2$ распределена нормально с параметрами

$$E(z_1 \mid z_2) = E(z_1) + \frac{Cov(z_1, z_2)}{Var(z_2)}\left(z_2 - E(z_2)\right),$$

$$Var(z_1 \mid z_2) = Var(z_1) - \frac{Cov^2(z_1, z_2)}{Var(z_2)}$$

$(Var(x) = E\left[(x - Ex)^2\right], Cov(x, y) = E\left[(x - Ex)(y - Ey)\right])$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- В нашем случае:

$$
\begin{aligned}
x = \mu + \sigma\epsilon, \quad \mu = \mu_0 + \sigma_0\delta, \quad \epsilon, \delta \sim \mathcal{N}(0,1),\\
E(x) = \mu_0,\\
Var(x) = E(Var(x \mid \mu)) + Var(E(x \mid \mu)) = \sigma^2 + \sigma_0^2,\\
Cov(x, \mu) = E\left[(x - \mu_0)(\mu - \mu_0)\right] = \sigma_0^2.
\end{aligned}
$$

- Применив упражнение, получаем:

$$
\begin{aligned}
E(\mu \mid x) = \mu_0 + \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}(x - \mu_0) = \frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}x + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0,\\
Var(\mu \mid x) = \frac{\sigma^2\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2} = \frac{1}{\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}}.
\end{aligned}
$$

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Итого:

$$p(\mu \mid x) \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2} x + \frac{\sigma^2}{\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0, \left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{1}{\sigma^2}\right)^{-1}\right).$$

- Опять же, сложные вычисления можно забыть и пользоваться этими формулами.
- Замечание: часто используют $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$ как параметр нормального распределения (precision). Тогда

$$\tau_{\mu|x} = \tau_\mu + \tau.$$

Нормальное распределение: фиксируем σ

- А что, если данных больше, $x_1, \dots, x_n$?
- Тогда можно повторить всё то же самое, а можно заметить, что набор данных описывается своим средним.

Упражнение. Докажите, что если $p(x_i \mid \mu) \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ и x_i независимы, то $p(\bar{x} \mid \mu) \sim \mathcal{N}(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$.

Нормальное распределение: фиксируем σ

- Для апостериорной вероятности будет

$$p(\mu \mid x_1, \dots, x_n) \propto p(x_1, \dots, x_n \mid \mu) p(\mu) \propto p(\bar{x} \mid \mu) p(\mu) \propto p(\mu \mid \bar{x}).$$

- Подставляя в наш предыдущий результат, получим:

$$p(\mu \mid x_1, \dots, x_n) \sim \mathcal{N}\left(\frac{\sigma_0^2}{\sigma_0^2 + \frac{\sigma^2}{n}} x + \frac{\sigma^2}{n\sigma_0^2 + \sigma^2}\mu_0, \left(\frac{1}{\sigma_0^2} + \frac{n}{\sigma^2}\right)^{-1}\right).$$

Нормальное распределение: фиксируем μ

- Если зафиксировать μ и менять σ^2, то сопряжённым априорным распределением будет обратное гамма-распределение:

$$p(\sigma^2 \mid \alpha, \beta) \propto IG(\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} z^{-\alpha-1} \exp\left(\frac{-\beta}{z}\right).$$

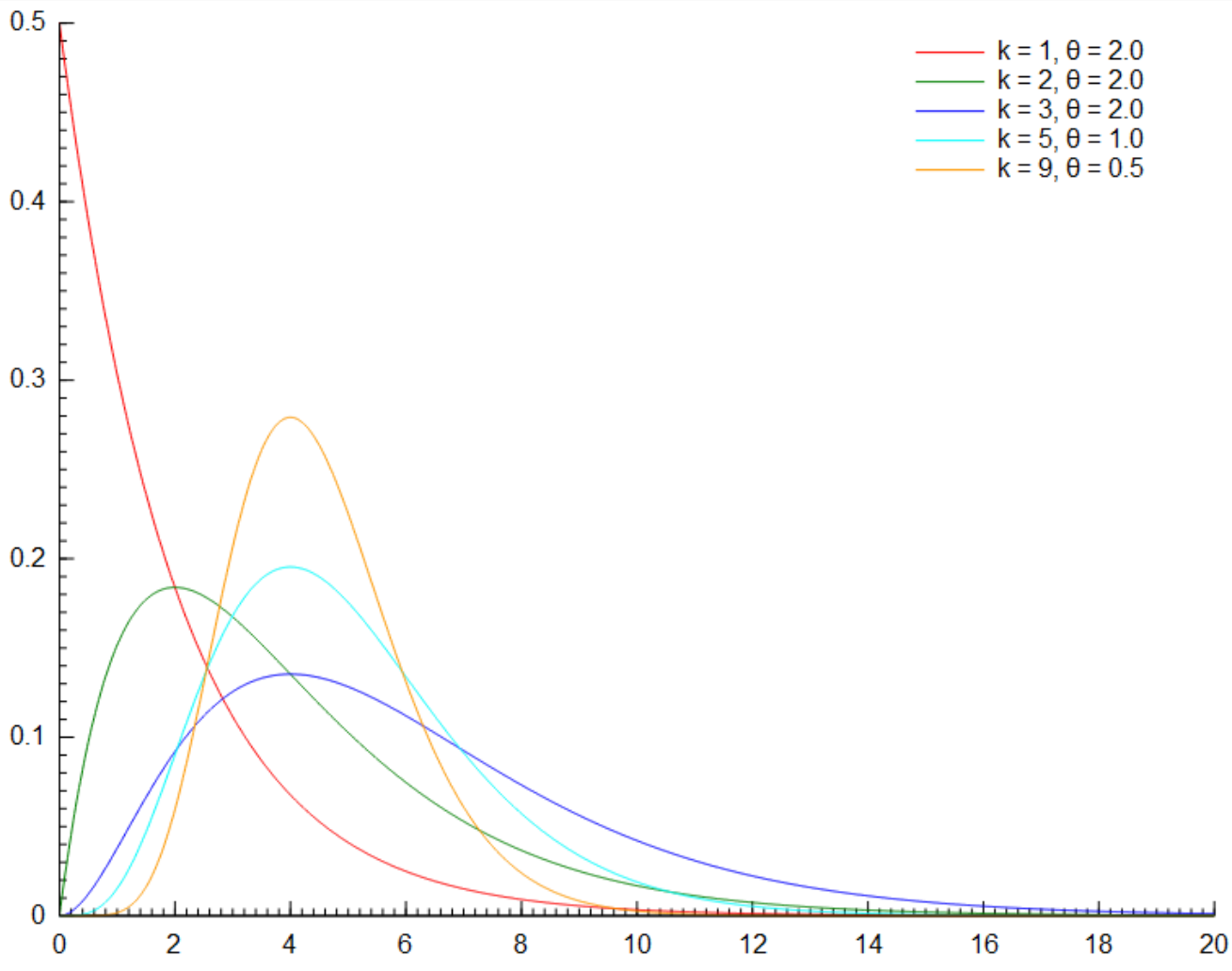
- Тогда в апостериорном распределении будет

$$p(\sigma^2 \mid x_1, \dots, x_n, \alpha, \beta) \propto IG\left(\alpha + \frac{n}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum(x_i - \mu)\right).$$

- А в терминах $\tau = \frac{1}{\sigma^2}$ будет обычное гамма-распределение:

$$p(\tau \mid x_1, \dots, x_n, \alpha, \beta) \propto \text{Gamma}\left(\alpha + \frac{n}{2}, \beta + \frac{1}{2}\sum(x_i - \mu)\right).$$

Гамма--распределение



Когда и μ, и σ^2 меняются

- Что делать, когда и μ, и σ^2 меняются?
- Можно было бы предположить, что μ и σ^2 независимы; тогда просто априорное распределение будет

$$p(\mu, \sigma \mid \mu_0, \sigma_0, \alpha, \beta) \propto \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2) \cdot IG(\alpha, \beta).$$

- К сожалению, это распределение не будет сопряжённым к нормальному. Почему?

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Что делать, когда и μ, и σ^2 меняются?
- Можно было бы предположить, что μ и σ^2 независимы; тогда просто априорное распределение будет

$$p(\mu, \sigma \mid \mu_0, \sigma_0, \alpha, \beta) \propto \mathcal{N}(\mu_0, \sigma_0^2) \cdot IG(\alpha, \beta).$$

- К сожалению, это распределение не будет сопряжённым к нормальному. Почему?
- Потому что μ и σ^2 зависимы. :) Новая точка x вводит зависимость между ними.
- В результате получается распределение Стьюдента.

Экспоненциальное семейство

- Вообще говоря, всё, о чём мы говорили – частные случаи *экспоненциального семейства* распределений:

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = h(\mathbf{x})g(\eta)e^{\eta^\top \mathbf{u}(\mathbf{x})}.$$

- η называются *естественными параметрами* (natural parameters).

Экспоненциальное семейство

- Например, распределение Бернулли:

$$p(x \mid \mu) = \mu^x (1-\mu)^{1-x} = e^{x \ln \mu + (1-x)\ln(1-\mu)} = \\ = (1-\mu) e^{\ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right) x},$$

и естественный параметр получился $\eta = \ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$:

$$p(x \mid \eta) = \sigma(-\eta) e^{-\eta x},$$

где $\sigma(y) = \frac{1}{1+e^{-y}}$ – *сигмоид-функция*.

Экспоненциальное семейство

- Для мультиномиального распределения с параметрами $\mu_1, \ldots, \mu_{M-1}$ получаются

$$\eta_k = \ln\left(\frac{\mu_k}{1 - \sum_j \mu_j}\right) \quad \text{и}$$

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = \left(1 + \sum_{k=1}^{M-1} e^{\eta_k}\right)^{-1} e^{\eta^\top \mathbf{x}}.$$

Упражнение. Проверьте!

Экспоненциальное семейство

- Так вот, для распределений из экспоненциального семейства

$$p(\mathbf{x} \mid \eta) = h(\mathbf{x})g(\eta)e^{\eta^\top \mathbf{u}(\mathbf{x})}$$

можно сразу оптом найти сопряжённые априорные распределения:

$$p(\eta \mid \chi, \nu) = f(\chi, \nu)g(\eta)^\nu e^{\nu\eta^\top \chi},$$

где χ – гиперпараметры, а g то же самое, что в исходном распределении.

Упражнение. Проверьте это и получите вышеописанные примеры как частные случаи.

Когда и μ, и σ^2 меняются

- В настоящем сопряжённом априорном распределении будут:

$$\begin{aligned} x \mid \mu, \tau &\sim \mathcal{N}(\mu, \tau), \\ \mu \mid \tau &\sim \mathcal{N}(\mu_0, n_0\tau), \\ \tau &\sim G(\alpha, \beta). \end{aligned}$$

- Давайте выясним, как изменятся параметры, и заодно докажем.

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Самое простое – это, по уже известным результатам,

$$\mu \mid x, \tau \sim \mathcal{N}\left(\frac{n\tau}{n\tau + n_0\tau}\bar{x} + \frac{n_0\tau}{n\tau + n_0\tau}\mu_0, n\tau + n_0\tau\right).$$

- Затем давайте разберёмся с $\tau \mid x$:

$$p(\tau, \mu \mid x) \propto p(\tau) \cdot p(\mu \mid \tau) \cdot p(x \mid \tau, \mu),$$

  и мы хотим это распределение маргинализовать по μ...

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Подсчитаем:

$$
\begin{aligned}
p(\tau, \mu \mid x) &\propto p(\tau) \cdot p(\mu \mid \tau) \cdot p(x \mid \tau, \mu) \\
&\propto \tau^{\alpha-1} e^{-\tau\beta} \cdot \tau^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{n_0 \tau}{2}(\mu-\mu_0)^2} \cdot \tau^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{\tau}{2}\sum(x_i-\mu)^2} \\
&\propto \tau^{\alpha+\frac{n}{2}-\frac{1}{2}} e^{-\tau\left(\beta+\frac{1}{2}\sum(x_i-\bar{x})^2\right)} e^{-\frac{\tau}{2}\left(n_0(\mu-\mu_0)^2+n(\bar{x}-\mu)^2\right)}
\end{aligned}
$$

(простой трюк: $x_i - \mu = x_i - \bar{x} + \bar{x} - \mu$).

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Теперь надо проинтегрировать

$$\int_{\mu} e^{-\frac{\tau}{2}\left(n_0(\mu-\mu_0)^2+n(\bar{x}-\mu)^2\right)} d\mu.$$

Упражнение. Проинтегрируйте. :) Должна получиться нормировочная константа

$$\tau^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{-nn_0\tau}{2(n+n_0)}(\bar{x}-\mu_0)^2}.$$

Когда и μ, и σ^2 меняются

- Таким образом, получается апостериорное распределение

$$p(\tau \mid x) \propto \tau^{\alpha+\frac{n}{2}-1} e^{-\tau\left(\beta+\frac{1}{2}\sum(x_i-\bar{x})^2+\frac{nn_0}{2(n+n_0)}(\bar{x}-\mu_0)^2\right)}.$$

- Итого результаты такие:

$$\begin{aligned} \mu \mid \tau, x &\sim \mathcal{N}\left(\tfrac{n\tau}{n\tau+n_0\tau}\bar{x}+\tfrac{n_0\tau}{n\tau+n_0\tau}\mu_0, n\tau+n_0\tau\right), \\ \tau \mid x &\sim G\left(\alpha+\tfrac{n}{2}, \beta+\tfrac{1}{2}\sum(x_i-\bar{x})^2+\tfrac{nn_0}{2(n+n_0)}(\bar{x}-\mu_0)^2\right). \end{aligned}$$

Предсказание

- Теперь предсказание нового x_{new}:

$$p(x_{\text{new}} \mid x) = \int\int \underbrace{\text{Gamma}}_{\tau|x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{\mu|\tau,x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{x_{\text{new}}|\tau,\mu} d\tau d\mu =$$

$$= \int \underbrace{\text{Gamma}}_{\tau|x} \int \underbrace{\text{Gaussian}}_{\mu|\tau,x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{x_{\text{new}}|\tau,\mu} d\tau d\mu =$$

$$= \int \underbrace{\text{Gamma}}_{\tau|x} \cdot \underbrace{\text{Gaussian}}_{x_{\text{new}}|\tau,x} d\tau = \ldots$$

- В результате получится распределение Стьюдента.

Параметрические и непараметрические модели

- Последнее замечание: модели бывают параметрические и непараметрические.
- Мы в основном будем заниматься моделями с фиксированным числом параметров, которые делают сильные предположения.
- Но есть класс непараметрических моделей, которые не делают предположений почти никаких (это не совсем правда), а основаны непосредственно на данных; они в некоторых ситуациях очень хороши, но плохо обобщаются на высокие размерности и большие датасеты.

Метод ближайших соседей

- Пример непараметрической модели: метод ближайших соседей.
- Давайте на примере задачи классификации.
- Не будем строить вообще никакой модели, а будем классифицировать новые примеры как

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \frac{1}{k} \sum_{\mathbf{x}_i \in N_k(\mathbf{x})} y_i,$$

где $N_k(\mathbf{x})$ – множество k ближайших соседей точки $\mathbf{x}$ среди имеющихся данных $(\mathbf{x}_i, y_i)_{i=1}^N$.

Метод ближайших соседей

- Единственный «параметр» – это k, но от него многое зависит.
- Для разумно большого k у нас в нашем примере стало меньше ошибок.
- Но это не предел – для $k = 1$ на тестовых данных вообще никаких ошибок нету!
- Что это значит? В чём недостаток метода ближайших соседей при $k = 1$?
- Как выбрать k? Можно ли просто подсчитать ошибку классификации и минимизировать её?

Проклятие размерности

- В прошлый раз k-NN давали гораздо более разумные результаты, чем линейная модель, особенно если хорошо выбрать k.
- Может быть, нам в этой жизни больше ничего и не нужно?
- Давайте посмотрим, как k-NN будет вести себя в более высокой размерности (что очень реалистично).

Проклятие размерности

- Давайте поищем ближайших соседей у точки в единичном гиперкубе. Предположим, что наше исходное распределение равномерное.
- Чтобы покрыть долю α тестовых примеров, нужно (ожидаемо) покрыть долю α объёма, и ожидаемая длина ребра гиперкуба-окрестности в размерности p будет $e_p(\alpha) = \alpha^{1/p}$.
- Например, в размерности 10 $e_{10}(0.1) = 0.8$, $e_{10}(0.01) = 0.63$, т.е. чтобы покрыть 1% объёма, нужно взять окрестность длиной больше половины носителя по каждой координате!
- Это скажется и на k-NN: трудно отвергнуть по малому числу координат, быстрые алгоритмы хуже работают.

Проклятие размерности

- Второе проявление the curse of dimensionality: пусть N точек равномерно распределены в единичном шаре размерности p. Тогда среднее расстояние от нуля до точки равно

$$d(p, N) = \left(1 - \frac{1}{2}^{1/N}\right)^{1/p},$$

  т.е., например, в размерности 10 для $N = 500$ $d \approx 0.52$, т.е. больше половины.
- Большинство точек в результаты ближе к границе носителя, чем к другим точкам, а это для ближайших соседей проблема – придётся не интерполировать внутри существующих точек, а экстраполировать наружу.

Проклятие размерности

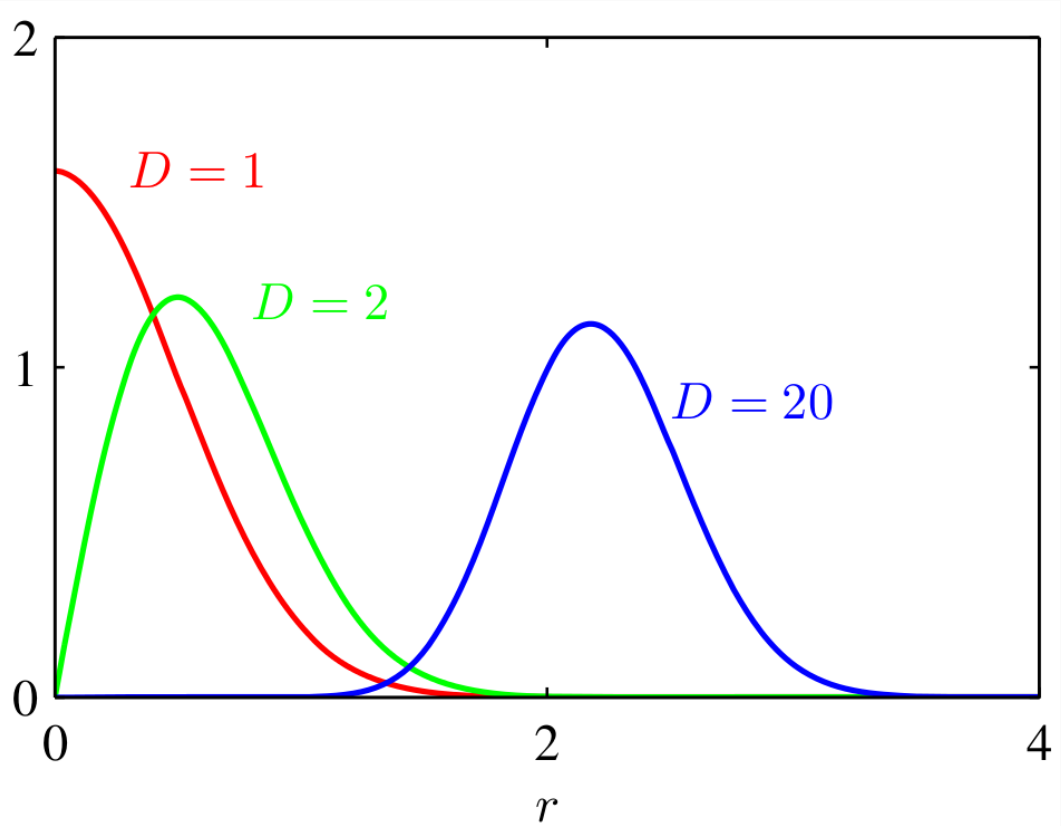
- Третье проявление: проблемы в оптимизации, которые и имел в виду Беллман.
- Если нужно примерно оптимизировать функцию от d переменных, на решётке с шагом ϵ понадобится примерно $\left(\frac{1}{\epsilon}\right)^d$ вычислений функции.
- В численном интегрировании – чтобы интегрировать функцию с точностью ϵ, нужно тоже примерно $\left(\frac{1}{\epsilon}\right)^d$ вычислений.

Проклятие размерности

- Плотные множества становятся очень разреженными. Например, чтобы получить плотность, создаваемую в размерности 1 при помощи $N = 100$ точек, в размерности 10 нужно будет 100^{10} точек.
- Поведение функций тоже усложняется с ростом размерности – чтобы строить регрессии в высокой размерности с той же точностью, может потребоваться экспоненциально больше точек, чем в низкой размерности.
- А у линейной модели ничего такого не наблюдается, она не подвержена проклятию размерности.

Проклятие размерности

- Ещё пример: нормально распределённая величина будет сосредоточена в тонкой оболочке.



Упражнение. Переведите плотность нормального распределения в полярные координаты и проверьте это утверждение.

Статистическая теория принятия решений

Функция потери

- Сейчас мы попытаемся понять, что же на самом деле происходит в этих методах.
- Начнём с обычной регрессии – непрерывный вещественный вход $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$, непрерывный вещественный выход $y \in \mathbb{R}$; у них есть некоторое совместное распределение $p(\mathbf{x}, y)$.
- Мы хотим найти функцию $f(\mathbf{x})$, которая лучше всего предсказывает y.

Функция потери

- Введём *функцию потери* (loss function) $L(y, f(\mathbf{x}))$, которая наказывает за ошибки; естественно взять квадратичную функцию потери

$$L\left(y, f(\mathbf{x})\right) = \left(y - f(\mathbf{x})\right)^2.$$

- Тогда каждому f можно сопоставить *ожидаемую ошибку предсказания* (expected prediction error):

$$\mathrm{EPE}(f) = \mathrm{E}(y - f(\mathbf{x}))^2 = \int\int (y - f(\mathbf{x}))^2 p(\mathbf{x}, y) d\mathbf{x} dy.$$

- И теперь самая хорошая функция предсказания $\hat{f}$ – это та, которая минимизирует $\mathrm{EPE}(f)$.

Функция потери

- Это можно переписать как

$$\mathrm{EPE}(f) = \mathrm{E}_{\mathbf{x}\mathrm{E}_{y|\mathbf{x}}[(y-f(\mathbf{x}))^2|\mathbf{x}]},$$

  и, значит, можно теперь минимизировать EPE поточечно:

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \arg\min_c \mathrm{E}_{y|\mathbf{x}'} \left[(y-c)^2 \mid \mathbf{x}' = \mathbf{x}\right],$$

  а это можно решить и получить

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}_{y|\mathbf{x}'}(y \mid \mathbf{x}' = \mathbf{x}).$$

- Это решение называется *функцией регрессии* и является наилучшим предсказанием y в любой точке $\mathbf{x}$.

k-NN

- Теперь мы можем понять, что такое k-NN.
- Давайте оценим это ожидание:

$$f(\mathbf{x}) = \mathrm{E}_{y|\mathbf{x}'}(y \mid \mathbf{x}' = \mathbf{x}).$$

- Оценка ожидания – это среднее всех y с данным $\mathbf{x}$. Конечно, у нас таких нету, поэтому мы приближаем это среднее как

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \mathrm{Average}\left[y_i \mid \mathbf{x}_i \in N_k(\mathbf{x})\right].$$

- Это сразу два приближения: ожидание через среднее и среднее в точке через среднее в ближних точках.
- Иначе говоря, k-NN предполагает, что в окрестности $\mathbf{x}$ функция $y(\mathbf{x})$ не сильно меняется, а лучше всего – она кусочно-постоянна.

Линейная регрессия

- А линейная регрессия – это модельный подход, мы предполагаем, что функция регрессии линейна от своих аргументов:

$$f(\mathbf{x}) \approx \mathbf{x}^\top \mathbf{w}.$$

- Теперь мы не берём условие по $\mathbf{x}$, как в k-NN, а просто собираем много значений для разных $\mathbf{x}$ и обучаем модель.

Классификация

- То же самое можно и с задачей классификации сделать. Пусть у нас переменная g с K возможными значениями $g_1, \dots, g_k$ предсказывается.
- Введём функцию потери, равную 1 за каждый неверный ответ. Получим

$$\mathrm{EPE} = \mathrm{E}\left[L(g, \hat{g}(\mathbf{x}))\right].$$

- Перепишем как раньше:

$$\mathrm{EPE} = \mathrm{E}_{\mathbf{x}} \sum_{k=1}^{K} L(g_k, \hat{g}(\mathbf{x})) p(g_k \mid \mathbf{x}).$$

- Опять достаточно оптимизировать поточечно:

$$\hat{g}(\mathbf{x}) = \arg\min_g \sum_{k=1}^{K} L(g_k, \hat{g}(\mathbf{x})) p(g_k \mid \mathbf{x}).$$

Классификация

- Опять достаточно оптимизировать поточечно:

$$\hat{g}(\mathbf{x}) = \arg\min_g \sum_{k=1}^{K} L(g_k, \hat{g}(\mathbf{x}))p(g_k \mid \mathbf{x}).$$

- Для 0-1 функции потери это упрощается до

$$\hat{g}(\mathbf{x}) = \arg\min_g \left[1 - p(g \mid \mathbf{x})\right], \text{ т.е.}$$

$$\hat{g}(\mathbf{x}) = g_k, \text{ если } p(g_k \mid \mathbf{x}) = \max_g p(g \mid \mathbf{x}).$$

- Это называется *оптимальным байесовским классификатором*; если модель известна, то его обычно можно построить.

Bias-variance decomposition

- Рассмотрим совместное распределение $p(y, \mathbf{x})$ и квадратичную функцию потерь $L(y, f(\mathbf{x})) = (y - f(\mathbf{x}))^2$.
- Мы знаем, что тогда оптимальная оценка – это функция регрессии

$$\hat{f}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right] = \int yp(y \mid \mathbf{x})dx.$$

Bias-variance decomposition

- Давайте подсчитаем ожидаемую ошибку и перепишем её в другой форме:

$$\mathrm{E}[L] = \mathrm{E}[(y - f(\mathbf{x}))^2] = \mathrm{E}[(y - \mathrm{E}[y \mid \mathbf{x}] + \mathrm{E}[y \mid \mathbf{x}] - f(\mathbf{x}))^2] =$$
$$= \int (f(\mathbf{x}) - \mathrm{E}[y \mid \mathbf{x}])^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int (\mathrm{E}[y \mid \mathbf{x}] - y)^2 p(\mathbf{x}, y) d\mathbf{x} dy,$$

потому что

$$\int (f(\mathbf{x}) - \mathrm{E}[y \mid \mathbf{x}]) (\mathrm{E}[y \mid \mathbf{x}] - y) p(\mathbf{x}, y) d\mathbf{x} dy = 0.$$

Bias-variance decomposition

- Эта форма записи – разложение на bias-variance и noise:

$$\mathrm{E}[L] = \int \left(f(\mathbf{x}) - \mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right]\right)^2 p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int \left(\mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right] - y\right)^2 p(\mathbf{x}, y) d\mathbf{x} dy,$$

- Отсюда, кстати, тоже сразу видно, что от $f(\mathbf{x})$ зависит только первый член, и он минимизируется, когда

$$f(\mathbf{x}) = \hat{f}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right].$$

- A noise, $\int \left(\mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right] - y\right)^2 p(\mathbf{x}, y) d\mathbf{x} dy$, – это просто свойство данных, дисперсия шума.

Bias-variance decomposition

- Если бы у нас был всемогущий компьютер и неограниченный датасет, мы бы, конечно, на этом и закончили, посчитали бы $\hat{f}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right]$, и всё.
- Однако жизнь – борьба, и у нас есть только ограниченный датасет из N точек. Предположим, что этот датасет берётся по распределению $p(\mathbf{x}, y)$ – т.е. фактически рассмотрим много-много экспериментов такого вида:
  - взяли датасет D из N точек по распределению $p(\mathbf{x}, y)$;
  - подсчитали нашу чудо-регрессию;
  - получили новую функцию предсказания $f(\mathbf{x}; D)$.
- Разные датасеты будут приводить к разным функциям предсказания...

Bias-variance decomposition

- ...а потому давайте усредним теперь по датасетам.
- Наш первый член в ожидаемой ошибке выглядел как $\left(f(\mathbf{x}) - \hat{f}(\mathbf{x})\right)^2$, а теперь будет $\left(f(\mathbf{x}; D) - \hat{f}(\mathbf{x})\right)^2$, и его можно усреднить по D, применив такой же трюк:

$$\left(f(\mathbf{x}; D) - \hat{f}(\mathbf{x})\right)^2$$

$$= \left(f(\mathbf{x}; D) - \mathrm{E}_D\left[f(x; D)\right] + \mathrm{E}_D\left[f(x; D)\right] - \hat{f}(\mathbf{x})\right)^2$$

$$= \left(f(\mathbf{x}; D) - \mathrm{E}_D\left[f(x; D)\right]\right)^2 + \left(\mathrm{E}_D\left[f(x; D)\right] - \hat{f}(\mathbf{x})\right)^2 + 2(...)(...),$$

и в ожидании получится...

Bias-variance decomposition

- ...и в ожидании получится

$$\mathrm{E}_D\left[\left(f(\mathbf{x};D)-\hat{f}(\mathbf{x})\right)^2\right]=$$
$$=\mathrm{E}_D\left[\left(f(\mathbf{x};D)-\mathrm{E}_D\left[f(x;D)\right]\right)^2\right]+\left(\mathrm{E}_D\left[f(x;D)\right]-\hat{f}(\mathbf{x})\right)^2.$$

- Разложили на дисперсию $\mathrm{E}_D\left[\left(f(\mathbf{x};D)-\mathrm{E}_D\left[f(x;D)\right]\right)^2\right]$ и квадрат систематической ошибки $\left(\mathrm{E}_D\left[f(x;D)\right]-\hat{f}(\mathbf{x})\right)^2$; это и есть bias-variance decomposition.

Bias-variance-noise

$$\text{Expected loss} = (\text{bias})^2 + \text{variance} + \text{noise},$$

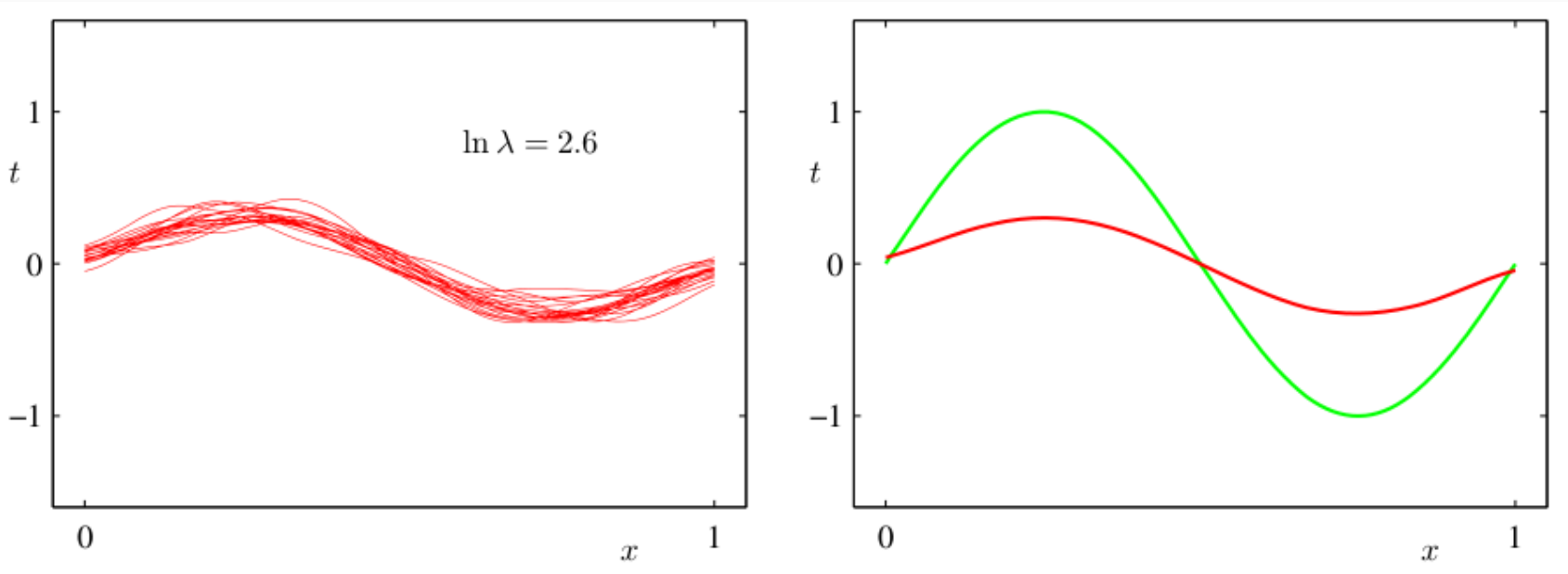
где

$$(\text{bias})^2 = \left(\mathrm{E}_D\left[f(x;D)\right] - \hat{f}(\mathbf{x})\right)^2,$$
$$\text{variance} = \mathrm{E}_D\left[\left(f(\mathbf{x};D) - \mathrm{E}_D\left[f(x;D)\right]\right)^2\right],$$
$$\text{noise} = \int \left(\mathrm{E}\left[y \mid \mathbf{x}\right] - y\right)^2 p(\mathbf{x},y)d\mathbf{x}dy.$$

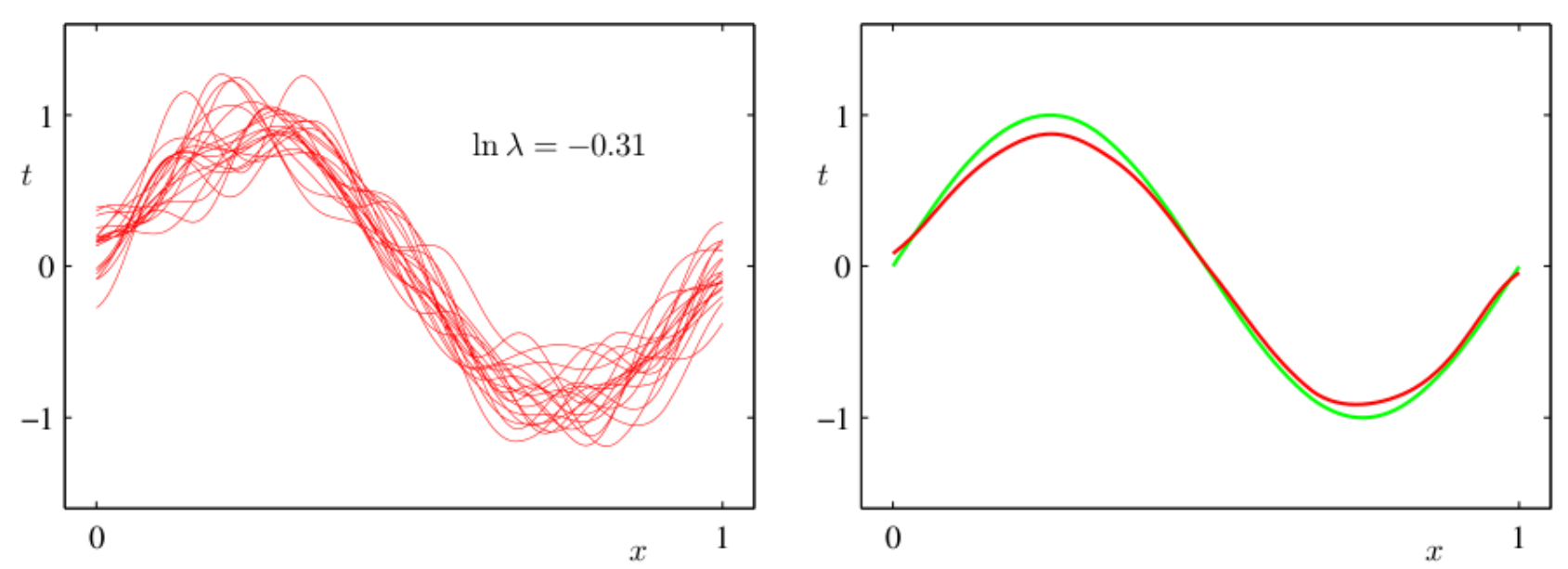
Пример

- Теперь давайте посмотрим на пример: опять та же синусоида, опять приближаем её линейной регрессией с полиномиальными признаками (максимальным их числом).
- И мы регуляризуем эту регрессию с параметром α.
- Будем набрасывать много датасетов и смотреть, что меняется при этом.

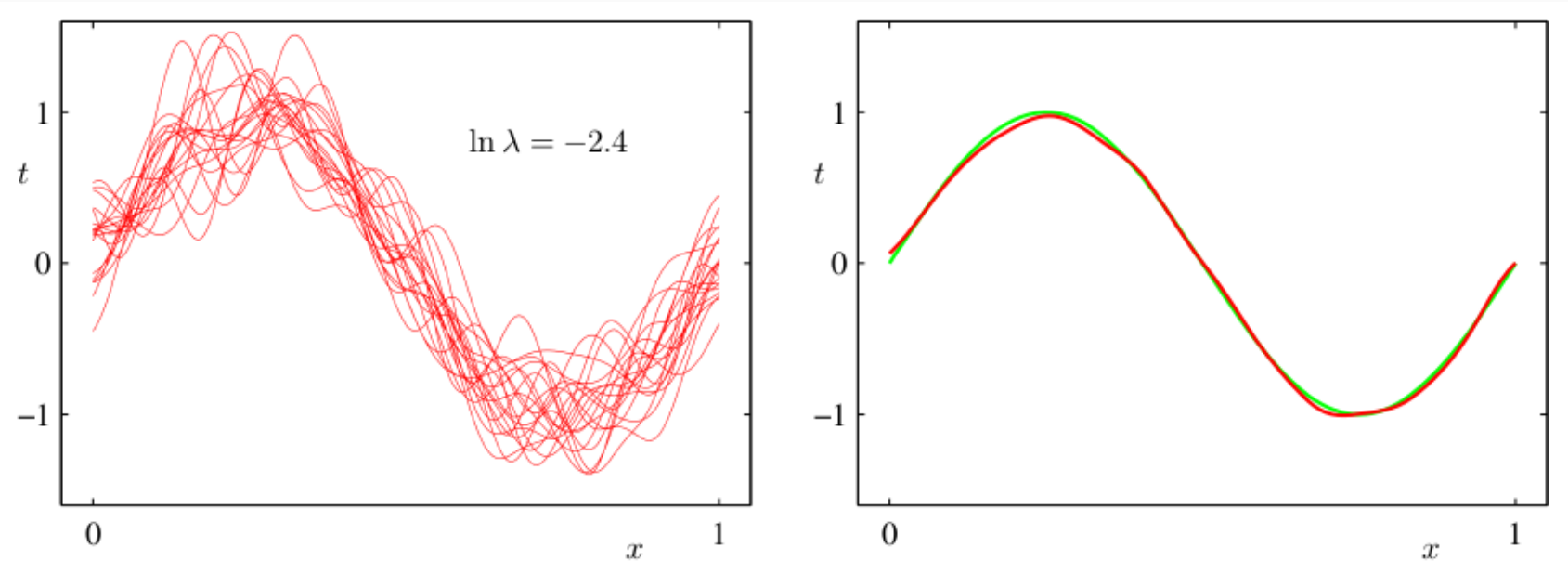
Регуляризатор и bias-variance



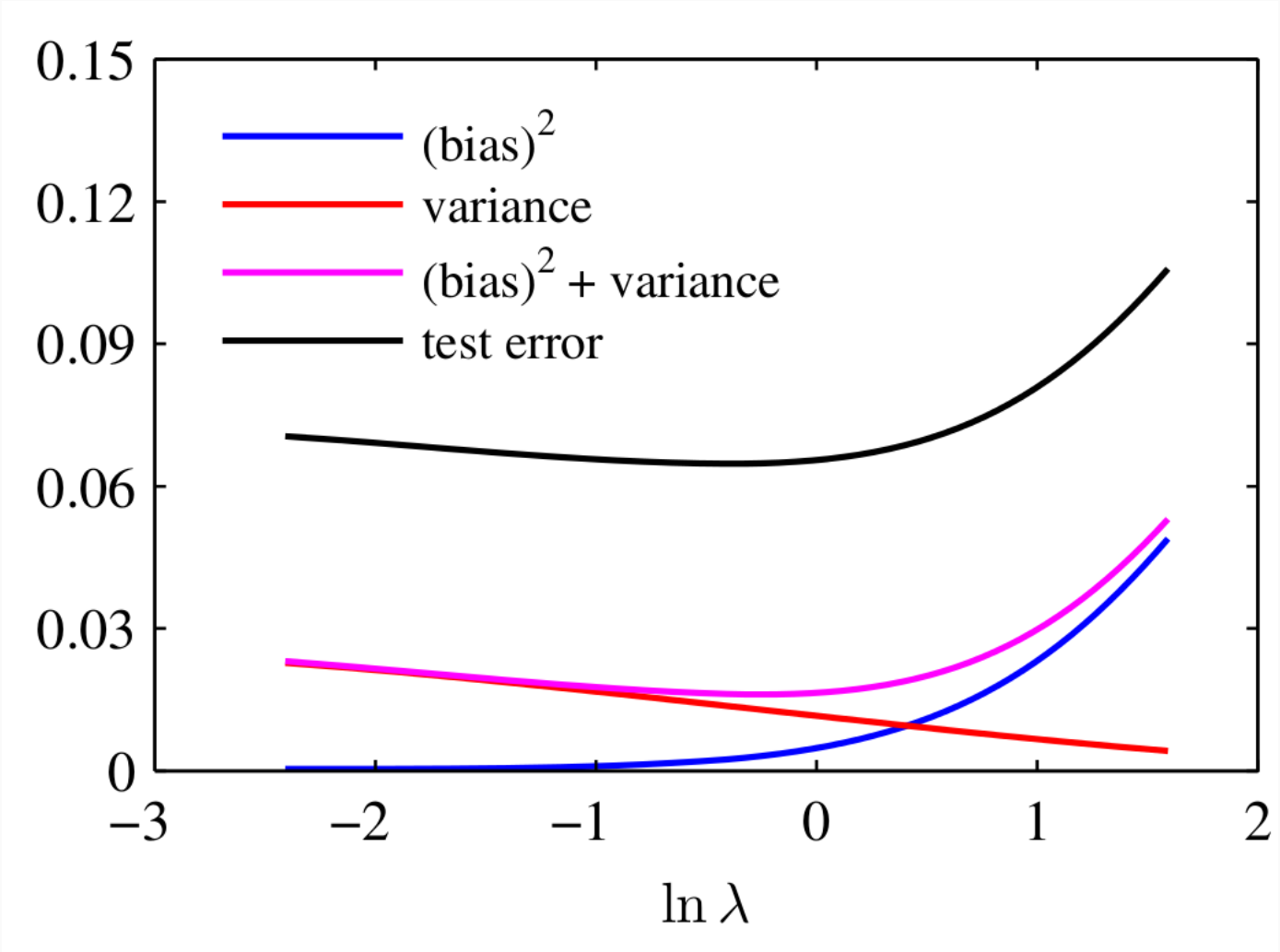
Регуляризатор и bias-variance



Регуляризатор и bias-variance



Регуляризатор и bias-variance



Спасибо!

Спасибо за внимание!