Линейная регрессия

Сергей Николенко

МНМЦ СПбГУ — Санкт-Петербург

07 октября 2020 г.

Random facts:

- 7 октября 3761 года до н.э. — точка отсчёта еврейского календаря; а сегодня 19 тишрея 5781 года
- 7 октября 1604 г. — официальная дата основания Томска; в этот день было закончено строительство томского острога
- 7 октября 1793 г. в Реймсе была прилюдно разбита Святая Стеклянница, миром которой мазали более тридцати королей Франции, в том числе, говорят, Хлодвига ещё в V веке
- 7 октября 1920 г. в Оксфорд были приняты первые 100 женщин, а 7 октября 1966 г. из СССР были высланы все китайские студенты
- 7 октября 1982 г. в Нью-Йорке прошла премьера мюзикла «Cats» от Эндрю Ллойд Уэббера и Тима Райса; последнее, 7685-е, представление состоялось на Бродвее в сентябре 2000 года

Сопряжённые априорные распределения

Напоминание

- Напоминаю, что основная наша задача – как обучить параметры распределения и/или предсказать следующие его точки по имеющимся данным.
- В байесовском выводе участвуют:
    - $p(x \mid \theta)$ – правдоподобие данных;
    - $p(\theta)$ – априорное распределение;
    - $p(x) = \int_\Theta p(x \mid \theta)p(\theta)d\theta$ – маргинальное правдоподобие;
    - $p(\theta \mid x) = \frac{p(x|\theta)p(\theta)}{p(x)}$ – апостериорное распределение;
    - $p(x' \mid x) = \int_\Theta p(x' \mid \theta)p(\theta \mid x)d\theta$ – предсказание нового x'.
- Задача обычно в том, чтобы найти $p(\theta \mid x)$ и/или $p(x' \mid x)$.

Априорные распределения

- Когда мы проводим байесовский вывод, у нас, кроме правдоподобия, должно быть ещё *априорное распределение* (prior distribution) по всем возможным значениям параметров.
- Мы раньше к ним специально не присматривались, но они очень важны.
- Задача байесовского вывода – как подсчитать $p(\theta \mid x)$ и/или $p(x' \mid x)$.
- Но чтобы это сделать, сначала надо выбрать $p(\theta)$. Как выбирать априорные распределения?

Сопряжённые априорные распределения

- Разумная цель: давайте будем выбирать распределения так, чтобы они оставались такими же и *a posteriori*.
- До начала вывода есть априорное распределение $p(\theta)$.
- После него есть какое-то новое апостериорное распределение $p(\theta \mid x)$.
- Я хочу, чтобы $p(\theta \mid x)$ тоже имело тот же вид, что и $p(\theta)$, просто с другими параметрами.

Сопряжённые априорные распределения

- Не слишком формальное определение: семейство распределений $p(\theta \mid \alpha)$ называется семейством *сопряжённых априорных распределений* для семейства правдоподобий $p(x \mid \theta)$, если после умножения на правдоподобие апостериорное распределение $p(\theta \mid x, \alpha)$ остаётся в том же семействе: $p(\theta \mid x, \alpha) = p(\theta \mid \alpha')$.
- α называются *гиперпараметрами* (hyperparameters), это «параметры распределения параметров».
- Тривиальный пример: семейство всех распределений будет сопряжённым чему угодно, но это не очень интересно.

Сопряжённые априорные распределения

- Разумеется, вид хорошего априорного распределения зависит от вида распределения собственно данных, $p(x \mid \theta)$.
- Сопряжённые априорные распределения подсчитаны для многих распределений, мы приведём несколько примеров.

Испытания Бернулли

- Каким будет сопряжённое априорное распределение для бросания нечестной монетки (испытаний Бернулли)?
- Ответ: это будет бета-распределение; плотность распределения нечестности монетки θ

$$p(\theta \mid \alpha, \beta) = \frac{\theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}.$$

Испытания Бернулли

- Плотность распределения нечестности монетки θ

$$p(\theta \mid \alpha, \beta) = \frac{\theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)}.$$

- Тогда, если мы посэмплируем монетку, получив s орлов и f решек, получится

$$p(s, f \mid \theta) = \binom{s+f}{s}\theta^{s}(1-\theta)^{f}, \text{ и}$$

$$p(\theta|s, f) = \frac{\binom{s+f}{s}\theta^{s+\alpha-1}(1-\theta)^{f+\beta-1}/B(\alpha, \beta)}{\int_0^1 \binom{s+f}{s}x^{s+\alpha-1}(1-x)^{f+\beta-1}/B(\alpha, \beta)dx} = \\ = \frac{\theta^{s+\alpha-1}(1-\theta)^{f+\beta-1}}{B(s+\alpha, f+\beta)}.$$

Испытания Бернулли

- Итого получается, что сопряжённое априорное распределение для параметра нечестной монетки θ – это

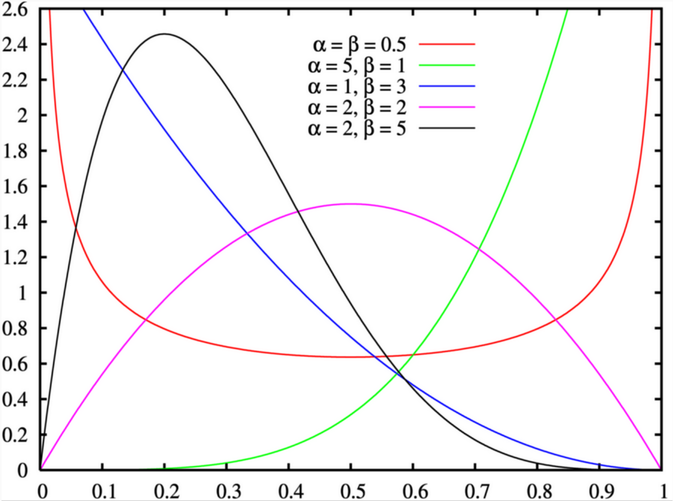
$$p(\theta \mid \alpha, \beta) \propto \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}.$$

- После получения новых данных с s орлами и f решками гиперпараметры меняются на

$$p(\theta \mid s+\alpha, f+\beta) \propto \theta^{s+\alpha-1}(1-\theta)^{f+\beta-1}.$$

- На этом этапе можно забыть про сложные формулы и выводы, получилось очень простое правило обучения (под обучением теперь понимается изменение гиперпараметров).

Бета–распределение



Мультиномиальное распределение

- Простое обобщение: рассмотрим мультиномиальное распределение с n испытаниями, k категориями и по x_i экспериментов дали категорию i.
- Параметры θ_i показывают вероятность попасть в категорию i:

$$p(x \mid \theta) = \binom{n}{x_1, \ldots, x_n} \theta_1^{x_1} \theta_2^{x_2} \ldots \theta_k^{x_k}.$$

- Сопряжённым априорным распределением будет распределение Дирихле:

$$p(\theta \mid \alpha) \propto \theta_1^{\alpha_1 - 1} \theta_2^{\alpha_2 - 1} \ldots \theta_k^{\alpha_k - 1}.$$

Мультиномиальное распределение

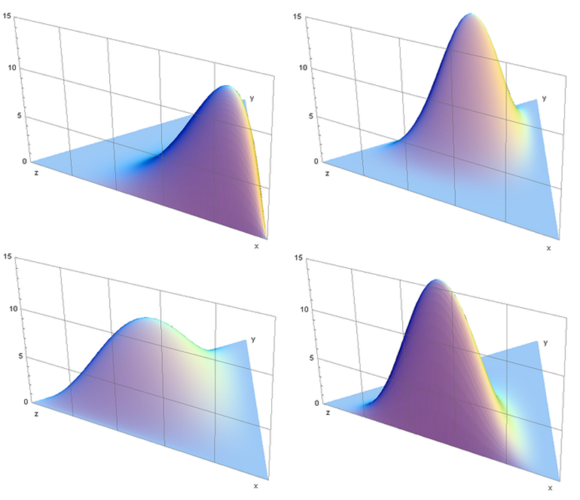
- Сопряжённым априорным распределением будет распределение Дирихле:

$$p(\theta \mid \alpha) \propto \theta_1^{\alpha_1 - 1}\theta_2^{\alpha_2 - 1} \ldots \theta_k^{\alpha_k - 1}.$$

Упражнение. Докажите, что при получении данных $x_1, \ldots, x_k$ гиперпараметры изменятся на

$$p(\theta \mid x, \alpha) = p(\theta \mid x + \alpha) \propto \theta_1^{x_1 + \alpha_1 - 1}\theta_2^{x_2 + \alpha_2 - 1} \ldots \theta_k^{x_k + \alpha_k - 1}.$$

Распределение Дирихле



Линейная регрессия

Метод наименьших квадратов

- Линейная регрессия: рассмотрим линейную функцию

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

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

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

Метод наименьших квадратов

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

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

- Как минимизировать?

Метод наименьших квадратов

- Можно на самом деле решить задачу точно – записать как

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

  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: $\left(\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^\top$ 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?

Байесовская регрессия

- 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

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

  Иными словами,

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

- Здесь пока y – любая функция.

Байесовская регрессия

- 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, $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$).

Байесовская регрессия

- 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 $\phi_j(\mathbf{x}) = e^{-\frac{(x-\mu_j)^2}{2s^2}}$);
    - ...

Байесовская регрессия

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

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

- Прологарифмируем (опустим X, т.к. по нему всегда условная вероятность будет):

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

Байесовская регрессия

- Прологарифмируем (опустим X, т.к. по нему всегда условная вероятность будет):

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

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

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

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

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

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

Байесовская регрессия

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

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

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

Оверфиттинг
в линейной регрессии

Полиномиальная аппроксимация

- Мы говорили о регрессии с базисными функциями:

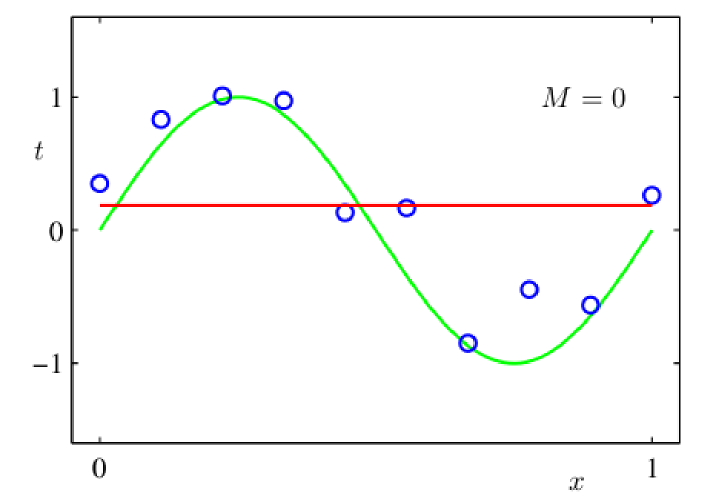
$$f(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^{M} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \phi(\mathbf{x}).$$

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

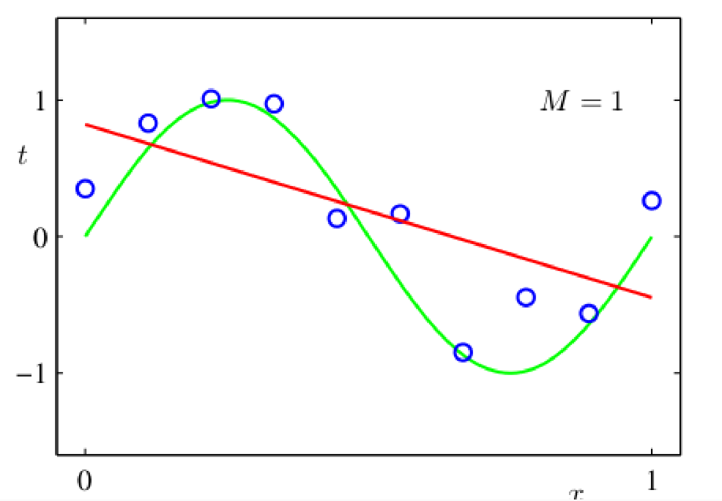
$$f(x, \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \ldots + w_M x^M.$$

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

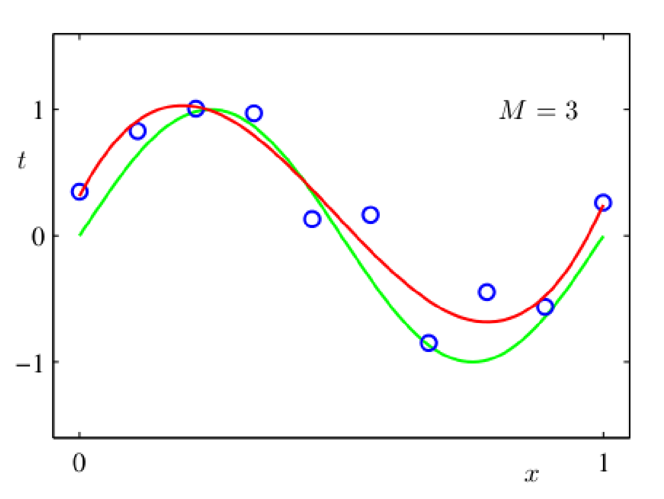
Полиномиальная аппроксимация



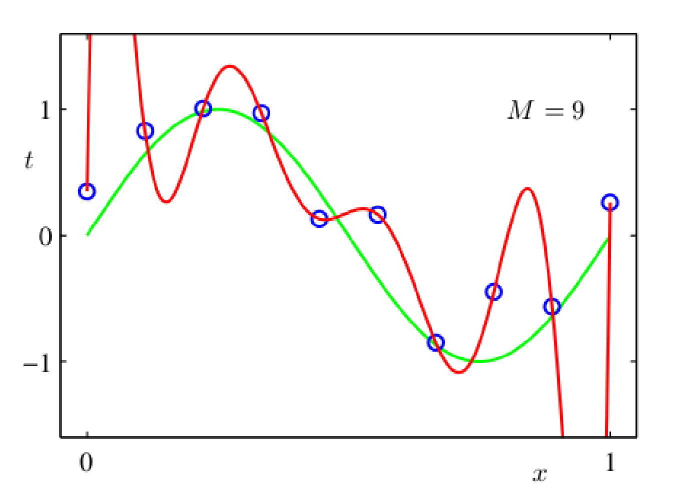
Полиномиальная аппроксимация



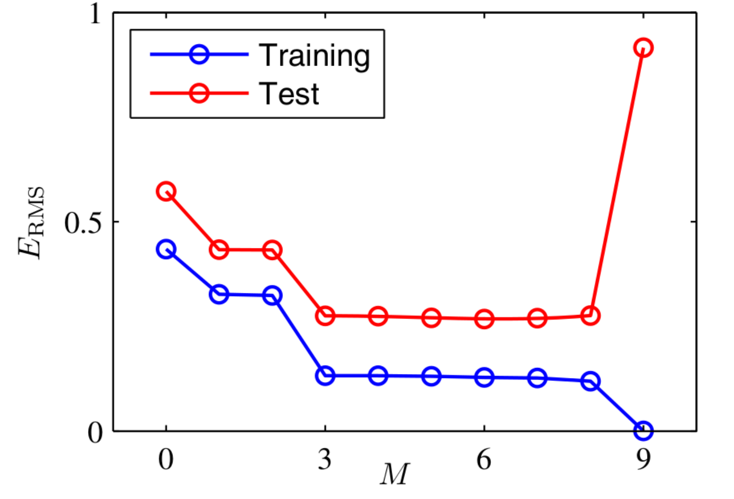
Полиномиальная аппроксимация



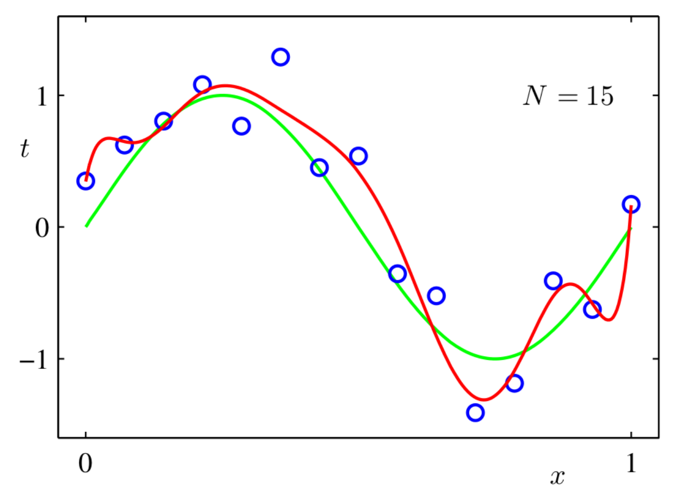
Полиномиальная аппроксимация



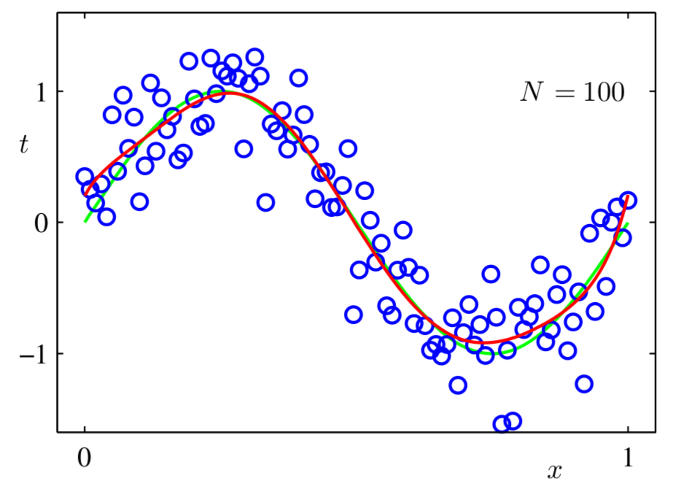
Значения RMS



Можно собрать больше данных...



Можно собрать больше данных...



Значения коэффициентов

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

Оверфиттинг

- Итак, мы увидели, что даже в линейной регрессии может наступить оверфиттинг.
- Что же делать?..

Регуляризация в линейной регрессии

Регуляризация

- 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.

Регуляризация

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

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

- Стало:

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

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

- Как оптимизировать эту функцию ошибки?

Регуляризация

- Да точно так же – запишем как

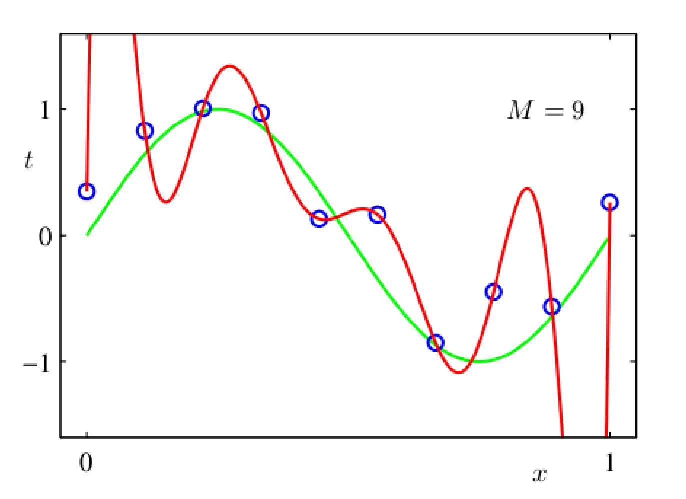
$$\mathrm{RSS}(\mathsf{w}) = \frac{1}{2}\left(\mathsf{y} - \mathsf{X}\mathsf{w}\right)^\top\left(\mathsf{y} - \mathsf{X}\mathsf{w}\right) + \frac{\alpha}{2}\mathsf{w}^\top\mathsf{w}$$

  и возьмём производную; получится

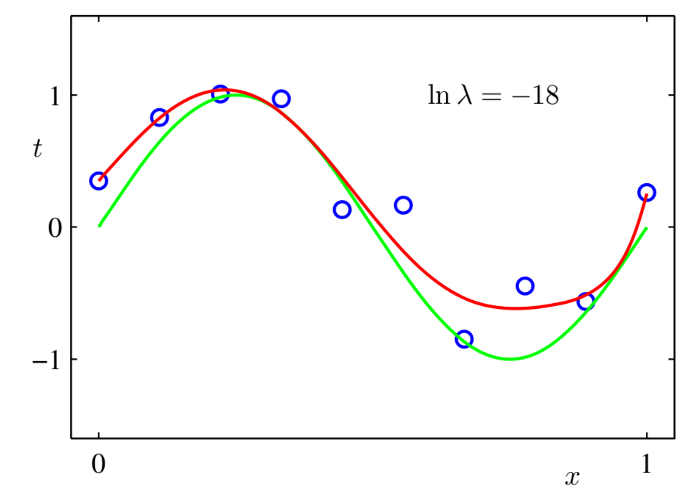
$$\mathsf{w}^* = \left(\mathsf{X}^\top\mathsf{X} + \alpha\mathsf{I}\right)^{-1}\mathsf{X}^\top\mathsf{y}.$$

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

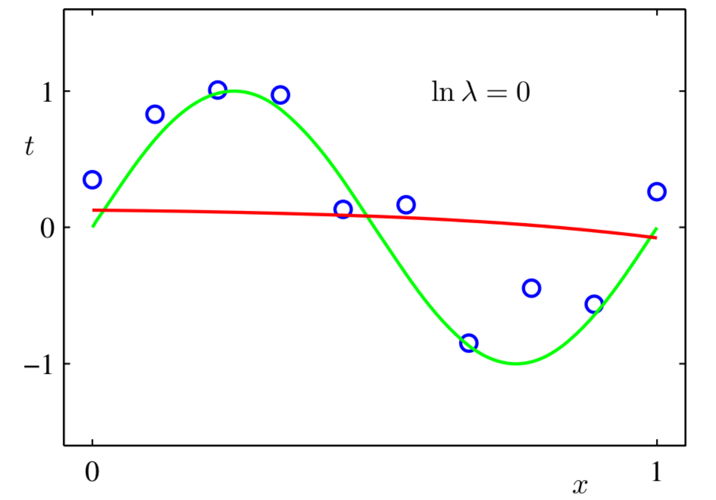
Гребневая регрессия: $\ln \alpha = -\infty$



Гребневая регрессия: $\ln \alpha = -18$



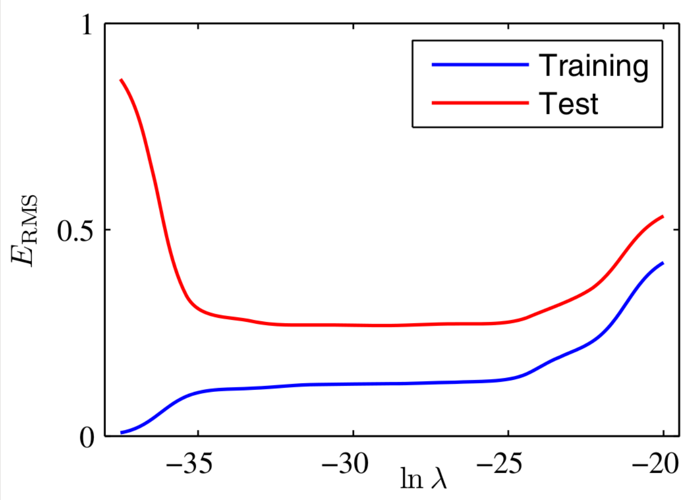
Гребневая регрессия: $\ln \alpha = 0$



Гребневая регрессия: коэффициенты

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

Гребневая регрессия: RMS



Другая регуляризация

- Почему именно так? Почему именно $\frac{\alpha}{2}\left\|\mathbf{w}\right\|^2$?
- Мы сейчас ответим на этот вопрос, но, вообще говоря, это не обязательно.
- Лассо-регрессия (lasso regression) регуляризует L_1-нормой, а не L_2:
$$\mathrm{RSS}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i, \mathbf{w}) - y_i)^2 + \alpha\sum_{j=0}^{M}|w_j|.$$
- Есть и другие типы; об этом будем говорить позже.

Спасибо!

Спасибо за внимание!