

Poglavje 4

Linearna regresija

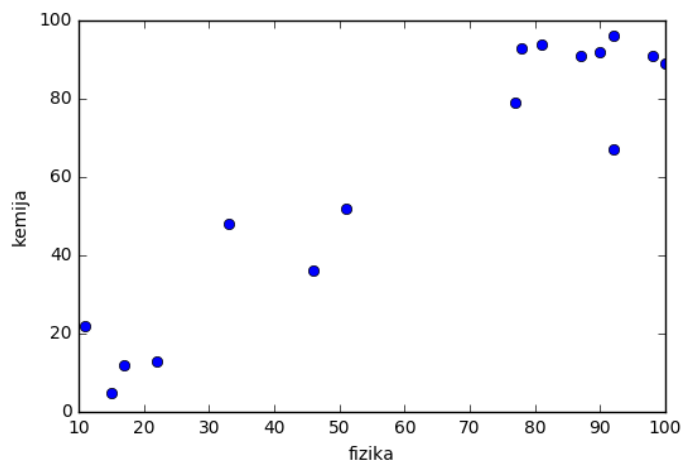
Vinkove rezultate iz kemije so založili. Enostavno, komisija je izgubila izpitne pole. Rešitev: Vinko bo kemijo pisal še enkrat. Ampak, ne more, je ravno odšel na trening odbojke v Rio. Ravnatelj pravi, da je tako ali tako vseeno, ker da eksterci ne štejejo. Bi pa razredničarka silno želela imeti to oceno, da lahko Vinka uvrsti v primerno učno skupino. V zbornici je učiteljica fizike rekla, da so ocene iz kemije tako ali tako podobne tem iz fizike (slika 4.1). Zamrmrala je še nekaj okoli regresijskih modelov in premic, potem pa odšla na mete Galilejeve krogle iz strehe. Tisti dan je niso več videli.

Tabela 4.1: Rezultati zunanjšega preverjanja za 16 učencev razreda 8.A iz fizike in kemije.

ime	fiz	kem
Albert	46	36
Branka	11	22
Cene	100	89
Dea	90	92
Edo	17	12
Franci	98	91
Helena	81	94
Ivan	33	48
Jana	87	91
Leon	77	79
Metka	78	93
Nika	15	5
Polona	22	13
Rajko	51	52
Stane	92	96
Zala	92	67

Vinko je fiziko pisal 70. Razredničarka je lepo prosila za pomoč učiteljico matematike, ki

je bila tisti dan posebej razpoložena. Začnimo z grafom, pravi. Tistim z ocenami iz fizike in kemije (slika 4.1).



Slika 4.1: Ocene fizike in kemije na razsevnem diagramu.

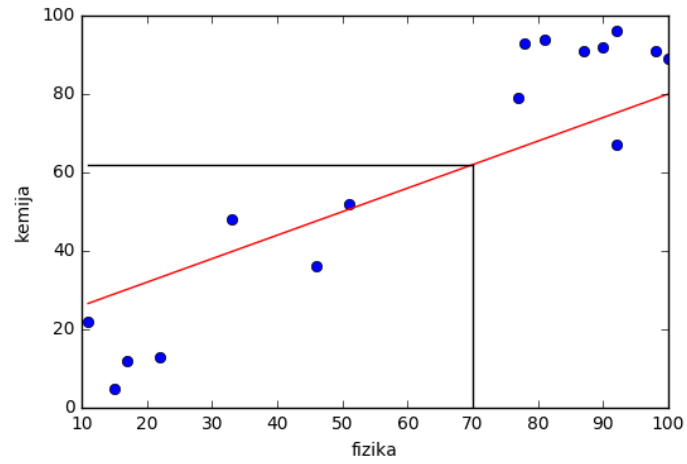
4.1 Linearni model ene spremenljivke in kriterijska funkcija

Učiteljica fizike ima kot kaže prav, ocene kemije in fizike so med sabo nekako povezane. Tudi učiteljica matematike ima prav: če se le da skušamo podatke najprej predstaviti v kakšnem grafu. Od tu dalje bomo poskušali sami. Morda začnemo s premico, ki ji bomo rekli kar model. Model zato, ker lahko za vsako oceno pri fiziki na podlagi modela napovemo oceno pri kemiji. Da bo vse skupaj zgledalo bolj učeno in primerno za univerzitetni študij, označimo oceno pri fiziki s spremenljivko x , oceno pri kemiji, ki jo računamo na podlagi ocene iz fizike in jo v našem modelu modeliramo pa z y . Ocena kemije je funkcija ocene iz fizike, zato lahko zapišemo:

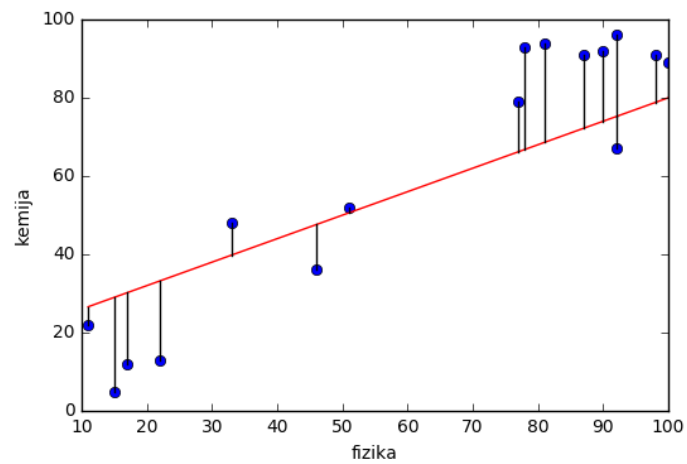
$$y = f(x) \quad (4.1)$$

Rekli smo, da bomo zadeve poenostavili in da bo naš model kar premica. Nekaj takega, kot kaže slika 4.2. Na njej bi iz ocene fizike 70 ocenili, da bo ocena kemije znašala 62. Ampak, ali je premica, ki jo kaže slika, res tista "prava"? Obstaja kakšna boljša premica, kakšen boljši model? Kako pa sploh ocenimo kvaliteto modela?

Za vsako točko v grafu, vsak znan podatek, torej za vsak par vrednosti $(x^{(i)}, y^{(i)})$ lahko izračunamo napako, ki jo dobimo, ko vrednost odvisne spremenljivke y napovemo z modelom. Napoved označimo z \hat{y} in za primer i izračunamo napako napovedi $e^{(i)} = \hat{y}^{(i)} - y^{(i)} = f(x) - y^{(i)}$. Vse napake za naš dani model in primere v učni množici smo označili na sliki 4.3.



Slika 4.2: Linearni model, ki iz ocene fizike izračuna oceno za kemijo. Za Vinkovo oceno iz fizike 70 predvidi, da je ocena pri kemiji enaka 62. Pravilno?



Slika 4.3: Napake linearnega modela na učni množici.

Napake $\epsilon^{(i)}$ so lahko pozitivne ali negativne. Pravzaprav nas predznak ne zanima, zanima nas samo velikost napake. In če že, nas ne zanimajo tiste majhne napake, ampak nas motijo predvsem tiste večje, recimo napake pri Zali in Albertu. Radi bi, da bi naš model bil tak, da bi napake, ki ga naredi pri napovedi primerov iz učne množice bile čim manjše. Razmišljanje iz tega odstavka lahko kvantificiramo, oziroma izrazimo numerično s funkcijo:

$$J = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m \epsilon^{(i)2} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (\hat{y}^{(i)} - y^{(i)})^2 = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m (f(y^{(i)}) - y^{(i)})^2 \quad (4.2)$$

Funkcijo J imenujemo *kriterijska funkcija*, ker z njo izrazimo našo preferenco, kakšen model bi radi imeli. Enačba za J je povprečna kvadrirana napaka. Povprečna zato, da lahko njeno vrednost primerjamo nad različno velikimi učnimi množicami. Kvadrirana zato, ker nam je vseeno, ali so napake pozitivne ali negativne in zato, da izpostavimo večje napake. Tisto dvojko v $\frac{1}{2m}$ smo tu dodali kar tako (ne škodi), kasneje pa se izkaže, da se nam pri kakšni operaciji okrajša in nam pride prav pri poenostavitvi rezultatov.

Radi bi, da bi bila vrednost kriterijske funkcije J čim manjša. Najbolje nič. A to vsaj pri naši učni množici z modelom - premico, ki mu od tu dalje lahko kar rečemo linearni model, ne bo šlo (če misliš pa, da gre, poskusi).

Premico lahko zapišemo z enačbo:

$$y = f(x) = ax + b \quad (4.3)$$

S tem, ko poznamo model, naša kriterijska funkcija postane funkcija dveh parametrov, parametra a in parametra b :

$$J(a, b) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m ((ax^{(i)} + b) - y^{(i)})^2 \quad (4.4)$$

Da povzamemo: oceno iz kemije bomo za Vinka ocenili tako, da bomo zgradili model, ki iz znanih ocen fizike in kemije pridobi model. Model bo tak, da bo za učno množico, torej za učence, kjer poznamo ocene iz obeh predmetov, iz ocene fizike izračunal oceno kemije. Želeli bi tak model, ki je na učni množici čim bolj natančen. Natančnost ocenimo z kriterijsko funkcijo J , katere vrednost izračunamo iz učnih podatkov in modela. Kriterijska funkcija je funkcija parametrov modela. Ker gradimo linearni model in ker je naš model premica v ravnini, sta parametra dva, a in b . Želeli bi torej pridobiti taka parametra, pri katerih je vrednost kriterijske funkcije najmanjša. Iskanju takih parametrov pravimo optimizacija.

4.2 Razmislek o optimizaciji

Tu se bomo delali, da o optimizaciji še nimamo pojma. (Čeprav to prav gotovo ni res, saj smo pri matematiki in nekaterih ostalih predmetih veliko slišali o njej. A nič hudega, da zadevo

ponovimo). Recimo da imamo funkcijo $J(a)$, torej funkcijo parametra a , in želimo poiskati vrednost parametra a^* , kjer je vrednost funkcije najmanjša. Dodatno recimo, da vemo, da je funkcija konveksna. Za konveksne funkcije velja, da so zvezne in da za vsak interval njene domene (vrednosti parametra a , za naš primer) velja, da vrednost funkcije v srednji točki intervala ne presega aritmetičnega povprečja vrednosti funkcije v skrajnih točkah intervala. Po domače, konveksna funkcija enega parametra ima obliko črke U. Recimo tudi, da funkcije $J(a)$ nimamo zapisane analitično, a da lahko izvemo oziroma povprašamo po njeni vrednosti za dano vrednost parametra.

Naše iskanje minimuma funkcije $J(a)$ lahko začnemo v neki točki. Recimo, v točki nič. V tej točki nas pravzaprav raje kot njena vrednost zanima njen odvod. Če je odvod enak nič (ali pa zelo blizu ničle), potem vemo, da smo našli pravo vrednost parametra a . Če je odvod pozitiven, vemo da smo s parametrom a desno od optimalne vrednosti a^* , in da je $a^* < a$. Če je odvod funkcije $J(a)$ negativen, bo vrednost a^* morala biti večja od trenutne vrednosti a . Odvoda funkcije J , torej $dJ(a)/da$ nimamo zapisanega v analitični obliki. Odvod pri izbrani vrednosti parametra a ni nič drugega kot naklon funkcije v tej točki, to pa lahko približno izračunamo tako, da pogledamo, kakšne so vrednosti te funkcije malce stran od točke a , na levo in na desno:

$$\left. \frac{\Delta J(a)}{\Delta a} \right|_a = \frac{J(a + \delta) - J(a - \delta)}{2\delta} \quad (4.5)$$

Ko vemo za odvod $J(a)$, lahko našo trenutno rešitev, torej začetno točko a , premaknemo v nasprotni smeri odvoda. Še enkrat, v nasprotni zato, ker iščemo minimum. Torej

$$a \leftarrow a - \alpha \left. \frac{dJ(a)}{da} \right|_a \quad (4.6)$$

Vrednost α nam določa, za koliko se premaknemo. Tipično lahko izberemo neko majhno vrednost, recimo $\alpha = 0.1$.

Pythonovska implementacija iskanja optimalne vrednosti bi lahko torej bila nekako takšna:

```
def derivative(f, a, delta=1e-3):
    return (f(a+delta) - f(a-delta)) / (2*delta)

a = 8
for _ in range(10):
    a = a - 0.2 * derivative(J, a)
    print("%.2f" % a)
```

Tokrat smo se odločili, da naše iskanje optimalne vrednosti a^* pričnemo pri $a = 8$ in da je $\alpha = 2$. Za funkcijo

```
def J(a):
    return (a-5)**2+3
```

Dobimo naslednji izpis:

```
6.80
6.08
```

5.65
 5.39
 5.23
 5.14
 5.08
 5.05
 5.03
 5.02

Kar je kar fino, saj smo že v desetih korakih prišli precej blizu prave vrednosti a^* . Pravi vrednosti bi se lahko, zaradi konveksnosti naše kriterijske funkcije, s primernim številom iteracij in s primerno vrednostjo α poljubno približali.

Pri zgornji optimizaciji smo predpostavili, da odvoda funkcije ne poznamo. Če bi imeli na voljo funkcijo, ki bi nam neposredno izračunala odvod, torej tako, da bi ga izračunala brez klica osnovne funkcije, bi nam bilo še enostavneje in odvoda potem ne bi rabili ocenjevati. Za dano funkcijo $J(a)$ v zgornjem primeru bi tako lahko izračunali njen analitični odvod, ter tega uporabili v zapisu funkcije derivative. Bi znal ustrezno spremeniti kodo? Dobiš podobne rezultate, kot jih dobimo s približkom za odvod?

4.3 Iskanje parametrov univariatne linearne regresije

Tako učeno pravimo modelu - premici, s katerim bomo napovedovali ocene kemije iz ocen fizike. Univariatne zato, ker je to linearna regresija nad enim samim atributom x (attribute imenujemo tudi variate). Linearna zato, ker je povezava med atributi in vrednostjo modela linearna ($ax+b$). Regresija zato, ker je izhod modela zvezna vrednost (drugačni od regresijskih modelov bodo klasifikacijski, ki še pridejo na vrsto).

Pri linearni regresiji iščemo take parametre regresije, torej parametre modela, ki nam dajo minimalno vrednost kriterijske funkcije J . V prejšnjem razdelku smo si pogledali trik, kako tako vrednost poiščemo v primeru, ko je J funkcija enega samega parametra. A pri univariatni analizi je ta funkcija odvisna od dveh parametrov, torej $J = J(a, b)$. Zato bomo iskanje optimalne vrednosti parametrov a^* in b^* pričeli pri neki vrednosti teh parametrov, potem pa te vrednosti popravljali, pač glede na odvod po vsakem od parametrov. Lahko torej zapišemo:

$$a \leftarrow a - \alpha \left. \frac{dJ(a, b)}{da} \right|_{a, b} \quad (4.7)$$

$$b \leftarrow b - \alpha \left. \frac{dJ(a, b)}{db} \right|_{a, b} \quad (4.8)$$

Pravzaprav kakšne večje spremembe glede na stvari iz prejšnjega razdelka ni, dela pa je le malce več, ker moramo izračunati odvod po enem in drugem parametru. Odvod bi lahko izračunali tudi numerično, tako, kot smo to počeli zgoraj, a ker kriterijsko funkcijo poznamo,

ne bo odveč, da odvod izračunamo analitično. Upoštevamo, da je odvod vsote enak vsoti odvodov. Spomnimo, odvajamo torej kriterijsko funkcijo iz enačbe 4.2, njena odvoda po parametrih a in b sta:

$$\frac{\partial J(a, b)}{\partial a} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m ((ax^{(i)} + b) - y^{(i)})x^{(i)} \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial J(a, b)}{\partial b} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m ((ax^{(i)} + b) - y^{(i)}) \quad (4.10)$$

Pri odvajanju smo izgubili konstanto 2 v imenovalcu normalizacijskega člena $\frac{1}{2m}$. Omenimo samo, da bi lahko odvoda zložili v vektor in s tem dobili nekaj, čemur pravimo gradient. Ne se ustrašit, gradient je čisto preprosta zadeva: funkcijo z več parametri smo vsakič odvajali po posameznem parametru, in s tem dobili vektor, ki ga imenujemo gradient funkcije.

Rezultat zglada zanimivo enostaven, a je bila, navkljub seštevanju, taka tudi naša kriterijska funkcija. Izpišimo sedaj korak osveževanja vrednosti parametrov a in b , ki jih uporabljamo pri iskanju našega linearnega modela:

$$a \leftarrow a - \frac{\alpha}{m} \sum_{i=1}^m ((ax^{(i)} + b) - y^{(i)})x^{(i)} \quad (4.11)$$

$$b \leftarrow b - \frac{\alpha}{m} \sum_{i=1}^m ((ax^{(i)} + b) - y^{(i)}) \quad (4.12)$$

Pythonovska koda za ta osvežitveni korak je preprosta in predvideva, da so podatki shranjeni v seznamih (vektorjih) x in y :

```
def update(a, b, alpha=0.0001):
    cons = alpha / len(x)
    a = a - cons * sum(((a*xi+b)-yi)*xi for xi, yi in zip(x, y))
    b = b - cons * sum(((a*xi+b)-yi) for xi, yi in zip(x, y))
    return a, b
```

Če našo optimizacijo pričnemo v točki $(0, 0)$ je konvergenca relativno hitra in se do rešitve prebijemo že po nekaj iteracijah:

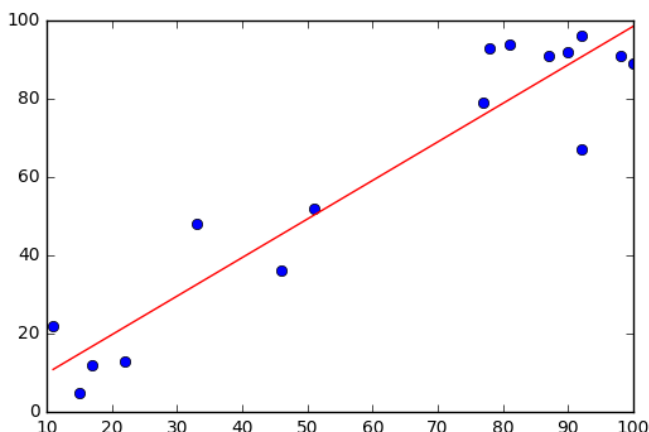
```
a, b = 0, 0
for _ in range(10):
    a, b = update(a, b)
    print("%.3f %.3f" % (a, b))
```

Zgornja koda namreč izpiše:

```
0.479 0.003
0.726 0.005
0.852 0.006
0.918 0.006
0.951 0.006
```

```
0.968 0.006
0.977 0.007
0.982 0.007
0.984 0.007
0.985 0.007
```

Optimalni vrednosti parametrov a in b sta torej (približno) $a = 0.985$ in $b = 0.007$, naš model s podatki iz učne množice pa je prikazan na sliki 4.4.



Slika 4.4: Ocene fizike in kemije na razsevnem diagramu.

4.4 Multivariatna linearna regresija

Približek ocene za kemijo izračunan iz ocene za fiziko je sicer čisto v redu, a našo razredničarko in matematičarko mučijo ostale ocene. Namreč, zgubila se je ocene za kemijo, vse ostale ocene pa imamo. Ne samo za fiziko, ampak za slovenščino, matematiko, in ostale. Bi lahko zgradili linearni model, ki bi upošteval tudi ostale ocene? Torej, upošteval prav vse ostale attribute, ki so nam na razpolago. In zgradil linearni model.

Ker imamo sedaj več atributov (variat) gre za multivariatno linearno regresijo. Najprej nekaj sicer nam že dobro poznane notacije. Naj bo x vektor atributnih vrednosti. Privzemimo, da so vsi atributi zvezni in da imamo n različnih atributov, to je x_1, x_2, \dots, x_n . Označimo odvisno spremenljivko z y . Naš cilj je na podlagi učnih primerov, to je parov atributnih vektorjev in vrednosti odvisne spremenljivke (x, y) zgraditi model:

$$h_{\theta}(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \dots + \theta_n x_n \quad (4.13)$$

Tokrat smo namesto parametrov a in b parametre modela označili s črko θ , ter parametrom modela dodali tudi indeks. Parameter θ_0 ustreza prejšnjemu parametru b , θ_1 pa parametru

a. Da bo zapis bolj enostaven, določimo tudi x_0 ki naj vedno, to je, za vse primere, zavzame vrednost 1. Potem lahko zapišemo:

$$h_{\theta}(x) = \sum_{i=0}^n \theta_i x_i \quad (4.14)$$

oziroma v vektorski obliki

$$h(x) = \theta^T x \quad (4.15)$$

Parametre modela θ želimo izbrati tako, da bo napaka naše napovedi čim manjša. Napaka napovedi za i -ti primer, kjer je $\hat{y}^{(i)}$ napovedana vrednost, $y^{(i)}$ pa prava vrednost odvisne spremenljivke, je

$$\epsilon^{(i)} = \hat{y}^{(i)} - y^{(i)} = h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)} \quad (4.16)$$

Model smo tokrat označili s simbolom h , ker model predstavlja hipotezo nad našimi podatki. Napake v negativno in pozitivno smer obravnavamo enako, zato je kot prej tudi tu najbolje, da napako kar kvadriramo. Zanimajo nas taki parametri, pri katerih je kvadrat napake na učni množici minimalen, oziroma kjer se model čim bolj prilega učnim podatkom:

$$\min_{\theta} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \quad (4.17)$$

Na podlagi zgornjega kriterija zapišimo kriterijsko funkcijo. Kriterij pomnožimo z $\frac{1}{2}$, da nam bo lažje kasneje pri izpeljavi odvodov, ter z $1/m$ da vrednost kriterijske funkcija ne bo odvisna od števila primerov:

$$J(\theta) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \quad (4.18)$$

Naš cilj je sedaj poiskati take vrednosti parametrov, pri katerih bo kriterijska funkcija $J(\theta)$ minimalna, oziroma take vrednosti, pri katerem se bo glede na našo izbrano kriterijsko funkcijo naš modelov čim bolj prilegal dani učni množici.

4.5 Metoda najhitrejšega spusta

Iskanje optimalnih parametrov začnimo v neki točki, na primer kar v $\theta = \vec{0}$. Potem spreminjamo θ tako, da se $J(\theta)$ zmanjšuje, to je, v nasprotni smeri parcialnega odvoda kriterijske funkcije. Enako, kot smo počeli v prejšnjem poglavju z parametroma a in b , le da tokrat ta korak zapišemo splošno za parameter θ_i :

$$\theta_i \leftarrow \theta_i - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta) \quad (4.19)$$

Konstanto α imenujemo stopnja učenja, njena vrednost pa bo narekovala, kako hitro bomo hiteli proti cilju. Če bo vrednost α prevelika, je možno, da bo preleteli cilj in se odstrelili v neskončnost. Če bo vrednost premajhna, bo konvergenca počasna.

Izpeljimo sedaj vrednost parcialnih odvodov oziroma vrednost gradienta, ko parcialne odvode zložimo v vektor. Pri tem zaenkrat privzemimo, da bomo vrednosti parametra θ_i prilagodili enem samemu primeru (x, y) :

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i} J(\theta) = \frac{\partial}{\partial \theta_i} \frac{1}{2m} (h_\theta(x) - y)^2 \quad (4.20)$$

$$= 2 \frac{1}{2m} (h_\theta(x) - y) \frac{\partial}{\partial \theta_i} (h_\theta(x) - y) \quad (4.21)$$

$$= \frac{1}{m} (h_\theta(x) - y) \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\theta_0 x_0 + \dots + \theta_i x_i + \dots + \theta_n x_n - y) \quad (4.22)$$

$$= \frac{1}{m} (h_\theta(x) - y) x_i \quad (4.23)$$

Vsakokratni popravek parametra θ_i bo tako:

$$\theta_i \leftarrow \theta_i - \frac{\alpha}{m} (h_\theta(x) - y) x_i \quad (4.24)$$

oziroma za vse primere:

$$\theta_i \leftarrow \theta_i - \frac{\alpha}{m} \sum_{j=1}^m (h_\theta(x^{(j)}) - y^{(j)}) x_i^{(j)} \quad (4.25)$$

Pri linearni regresiji oziroma zgoraj opisanemu pristopu najmanjših kvadratov je $J(\theta)$ kvadratna funkcija z enim samim minimumom, zato se nam o tem, da bi se optimizacija zaustavila v nekem lokalnem minimumu ni potrebno bati. Lahko pa, kot smo že zapisali zgoraj, pri velikih vrednostih α minimum zgrešimo in se pričnemo vse bolj oddaljevati od njega. Pomaga seveda zmanjšanje α na vrednost, pri kateri je optimizacija stabilne in skonstruira k pravi vrednosti parametrov θ .