Лекция 2. Обобщенные линейные модели. Регуляризация обучения.

Д. П. Ветров[1] Ю. И. Журавлев[1]

[1]МГУ, ВМиК, каф. ММП

Курс «Математические основы теории прогнозирования»

План лекции

План лекции

Краткое напоминание основных вероятностных понятий

- $X : \Omega \to \mathbb{R}$ – случайная величина
- Вероятность попадания величины в интервал (a, b) равна

$$P(a \leq X \leq b) = \int_a^b p(x)dx,$$

где $p(x)$ – плотность распределения X,

$$p(x) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1$$

- Если поведение случайной величины определяется некоторым параметром, возникают условные плотности $p(x|\theta)$. Если рассматривать условную плотность как функцию от параметра

$$f(\theta) = p(x|\theta),$$

то принято говорить о т.н. функции правдоподобия

Основная задача мат. статистики

- Распределение случайной величины X известно с точностью до параметра θ
- Имеется выборка значений величины X, $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$
- Требуется оценить значение θ
- Метод максимального правдоподобия

$$\hat{\theta}_{ML} = \arg\max f(\theta) = \arg\max p(\mathbf{x}|\theta) = \arg\max \prod_{i=1}^{n} p(x_i|\theta)$$

- Можно показать, что ММП является ассимптотически оптимальным при $n \to \infty$
- Увы, мир несовершенен. Величина n конечна и обычно не слишком велика
- Необходима регуляризация метода

Пример некорректного использования метода максимального правдоподобия
Задача восстановления смеси нормальных распределений

- $X \sim w_1\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2) + \dots + w_m\mathcal{N}(\mu_m, \sigma_m^2)$
- Необходимо определить $\boldsymbol{\theta} = (m, \mu_1, \sigma_1^2, \dots, \mu_m, \sigma_m^2, w_1, \dots, w_m)$
- Применяем ММП

$$p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} p(x_i|\boldsymbol{\theta}) =$$

$$\prod_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} \frac{w_j}{\sqrt{2\pi}\sigma_j}\exp\left(-\frac{\|x_i-\mu_j\|^2}{2\sigma_j^2}\right) \to \max_{\boldsymbol{\theta}}$$

- Решение

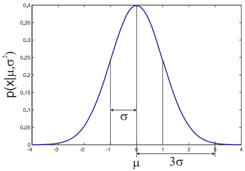
$$\hat{m}_{ML} = n$$
$$\hat{\mu}_{j,ML} = x_j$$
$$\hat{\sigma}^2_{j,ML} = 0$$
$$\hat{w}_{ML,j} = \frac{1}{n}$$

План лекции

Нормальное распределение

- Нормальное распределение играет важнейшую роль в математической статистике

$$X \sim \mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$
$$\mu = \mathbb{E}X, \quad \sigma^2 = \mathbb{D}X \triangleq \mathbb{E}(X-\mathbb{E}X)^2$$



- Из центральной предельной теоремы следует, что сумма независимых случайных величин с ограниченной дисперсией стремится к нормальному распределению
- На практике, многие случайные величины можно считать приближенно нормальными

Многомерное нормальное распределение

- Многомерное нормальное распределение имеет вид

$$X \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \Sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n \sqrt{\det \Sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu})\right),$$

  где $\boldsymbol{\mu} = \mathbb{E}X$, $\Sigma = \mathbb{E}(X-\boldsymbol{\mu})(X-\boldsymbol{\mu})^T$ — вектор математических ожиданий каждой из n компонент и матрица ковариаций соответственно
- Матрица ковариаций показывает, насколько сильно связаны (коррелируют) компоненты многомерного нормального распределения

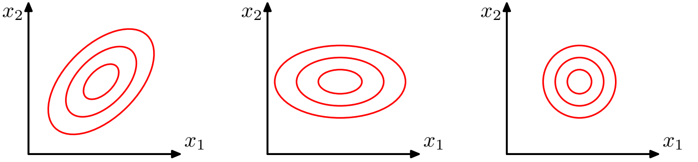
$$\Sigma_{ij} = \mathbb{E}(X_i - \mu_i)(X_j - \mu_j) = \mathrm{Cov}(X_i, X_j)$$

- Если мы поделим ковариацию на корень из произведений дисперсий, то получим коэффициент корреляции

$$\rho(X_i, X_j) \triangleq \frac{\mathrm{Cov}(X_i, X_j)}{\sqrt{\mathbb{D}X_i \mathbb{D}X_j}} \in [-1, 1]$$

Особенности нормального распределения

- Нормальное распределение полностью задается первыми двумя моментами (мат. ожидание и матрица ковариаций/дисперсия)
- Матрица ковариаций неотрицательно определена, причем на диагоналях стоят дисперсии соответствующих компонент
- Нормальное распределение имеет очень легкие хвосты: большие отклонения от мат. ожидания практически невозможны. Это обстоятельство нужно учитывать при приближении произвольных случайных величин нормальными



(a) (b) (c)

План лекции

Псевдообращение матриц

- Предположим, нам необходимо решить СЛАУ вида $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$
- Если бы матрица A была квадратной и невырожденной (число уравнений равно числу неизвестных и все уравнения линейно независимы), то решение задавалось бы формулой $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$
- Предположим, что число уравнений больше числа неизвестных, т.е. матрица A прямоугольная. Домножим обе части уравнения на A^T слева

$$A^T A\boldsymbol{x} = A^T\boldsymbol{b}$$

- В левой части теперь квадратная матрица и ее можно перенести в правую часть

$$\boldsymbol{x} = \left(A^T A\right)^{-1} A^T\boldsymbol{b}$$

- Операция $\left(A^T A\right)^{-1} A^T$ называется псевдообращением матрицы A, а $\boldsymbol{x}$ – псевдорешением

Нормальное псевдорешение

- Если матрица A^TA вырождена, псевдорешений бесконечно много, причем найти их на компьютере нетривиально
- Для решения этой проблемы используется ридж-регуляризация матрицы A^TA

$$A^TA + \lambda I,$$

где I – единичная матрица, а λ – коэффициент регуляризации. Такая матрица невырождена для любых $\lambda > 0$

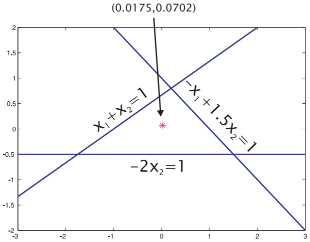
- Величина

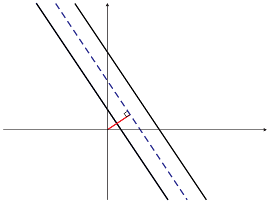
$$\boldsymbol{x} = \left(A^TA + \lambda I\right)^{-1} A^T\boldsymbol{b}$$

называется нормальным псевдорешением. Оно всегда единственно и при небольших положительных λ определяет псевдорешение с наименьшей нормой

Графическая иллюстрация

- Псевдорешение соответствует точке, минимизирующей невязку, а нормальное псевдорешение отвечает псевдорешению с наименьшей нормой





- Заметим, что псевдообратная матрица $\left(A^T A\right)^{-1} A^T$ совпадает с обратной матрицей A^{-1} в случае невырожденных квадратных матриц

План лекции

Основные обозначения

- В дальнейшем будут рассматриваться преимущественно задачи классификации и восстановления регрессии
- В этих задачах обучающая выборка представляет собой набор отдельных объектов $X = \{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^n$, характеризующихся вектором вещественнозначных признаков $\boldsymbol{x}_i = (x_{i,1}, \dots, x_{i,d})$
- Каждый объект также обладает скрытой переменной $t \in \mathcal{T}$
- Предполагается, что существует зависимость между признаками объекта и значением скрытой переменной
- Для объектов обучающей выборки значение скрытой переменной известно $\boldsymbol{t} = \{t_i\}_{i=1}^n$

Статистическая постановка задачи

- Каждый объект описывается парой $(\boldsymbol{x}, t)$
- При статистической (вероятностной) постановке задачи машинного обучения предполагается, что обучающая выборка является набором независимых, одинаково распределенных случайных величин, взятых из некоторой генеральной совокупности
- В этом случае уместно говорить о плотности распределения объектов $p(\boldsymbol{x}, t)$ и использовать вероятностные термины (математическое ожидание, дисперсия, правдоподобие) для описания и решения задачи
- Заметим, что это не единственная возможная постановка задачи машинного обучения

Качество обучения

- Качество обучения определяется точностью прогноза на генеральной совокупности
- Пусть $S(t, \hat{t})$ – функция потерь, определяющая штраф за прогноз $\hat{t}$ при истинном значении скрытой переменной t
- Разумно ожидать, что минимум этой функции достигается при $\hat{t} = t$
- Примерами могут служить $S_r(t, \hat{t}) = (t - \hat{t})^2$ для задачи восстановления регрессии и $S_c(t, \hat{t}) = I\{\hat{t} \neq t\}$ для задачи классификации

Абсолютный критерий качества

- Если бы функция $p(\boldsymbol{x}, t)$ была известна, задачи машинного обучения не существовало
- В самом деле абсолютным критерием качества обучения является мат. ожидание функции потерь, взятое по генеральной совокупности

$$\mathbb{E}S(t, \hat{t}) = \int S(t, \hat{t}(\boldsymbol{x}))p(\boldsymbol{x}, t)d\boldsymbol{x}dt \to \min,$$

  где $\hat{t}(\boldsymbol{x})$ – решающее правило, возвращающее величину прогноза для вектора признаков $\boldsymbol{x}$
- Вместо методов машинного обучения сейчас бы активно развивались методы оптимизации и взятия интегралов от функции потерь :)
- К сожалению (а может, к счастью), распределение объектов генеральной совокупности неизвестно, поэтому абсолютный критерий качества обучения не может быть подсчитан

План лекции

Идеальный классификатор

- Итак, одна из основных задач теории машинного обучения — это разработка способов косвенного оценивания качества решающего правила и выработка новых критериев для оптимизации в ходе обучения
- Рассмотрим задачу классификации с функцией потерь вида $S_c(t,\hat{t}) = I\{\hat{t} \neq t\}$ и гипотетический классификатор $t_B(\boldsymbol{x}) = \arg\max_{t\in\mathcal{T}} p(\boldsymbol{x},t) = \arg\max_{t\in\mathcal{T}} p(t|\boldsymbol{x})$
- Справедлива следующая цепочка неравенств

$$\mathbb{E}S(t,\hat{t}) = \int\int S(t,\hat{t}(\boldsymbol{x}))p(\boldsymbol{x},t)d\boldsymbol{x}dt =$$

$$\sum_{s=1}^{l}\int S(s,\hat{t}(\boldsymbol{x}))p(\boldsymbol{x},s)d\boldsymbol{x} = 1 - \int p(\boldsymbol{x},\hat{t}(\boldsymbol{x}))d\boldsymbol{x} \geq$$

$$\geq 1 - \int \max_t p(\boldsymbol{x},t)d\boldsymbol{x} = 1 - \int p(\boldsymbol{x},t_B(\boldsymbol{x}))d\boldsymbol{x} = \mathbb{E}S(t,t_B)$$

Идеальная регрессия

- Рассмотрим задачу восстановления регрессии с квадратичной функцией потерь вида $S_r(t,\hat{t})=(t-\hat{t})^2$ и гипотетическое решающее правило

$$t_B(\mathbf{x})=\mathbb{E}_{t|\mathbf{x}}t=\int tp(t|\mathbf{x})dt$$

- Справделива следующая цепочка неравенств

$$\mathbb{E}S(t,\hat{t})=\int\int S(t,\hat{t}(\mathbf{x}))p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}dt=$$

$$\int\int(t-\hat{t}(\mathbf{x}))^2p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}dt=\int\int((t-\mathbb{E}t)+(\mathbb{E}t-\hat{t}(\mathbf{x})))^2p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}dt=$$

$$=\int\int(t-\mathbb{E}t)^2p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}dt+2\int\int(t-\mathbb{E}t)(\mathbb{E}t-\hat{t}(\mathbf{x}))p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}dt+$$

$$+\int\int(\mathbb{E}t-\hat{t}(\mathbf{x}))^2p(\mathbf{x},t)d\mathbf{x}dt\geq$$

$$\geq\int\int(t-\mathbb{E}t)^2p(t|\mathbf{x})p(\mathbf{x})dtd\mathbf{x}=\mathbb{E}S(t,t_B(\mathbf{x}))$$

Особенности байесовских решающих правил

- Таким образом, знание распределения объектов генеральной совокупности приводит к получению оптимальных решающих правил в явной форме
- Такой оптимальные решающие правила называются байесовскими
- Если бы удалось с высокой точностью оценить значение условной плотности $p(t|\boldsymbol{x})$ для всех $\boldsymbol{x}$ и t, обе основные задачи машинного обучения можно было считать решенными
- На этом основан один из существующих подходов к машинному обучению

План лекции

Задача восстановления регрессии

- Задача восстановления регрессии предполагает наличие связи между наблюдаемыми признаками $\boldsymbol{x}$ и непрерывной переменной t
- В отличие от задачи интерполяции допускаются отклонения решающего правила от правильных ответов на объектах обучающей выборки
- Уравнение регрессии $y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w})$ ищется в некотором параметрическом виде путем нахождения наилучшего значения вектора весов

$$\boldsymbol{w}_* = \arg\max_{\boldsymbol{w}} F(X, \boldsymbol{t}, \boldsymbol{w})$$

Линейная регрессия

- Наиболее простой и изученной является линейная регрессия
- Главная особенность: настраиваемые параметры входят в решающее правило линейно
- Заметим, что линейная регрессия не обязана быть линейной по признакам
- Общее уравнение регрессии имеет вид

$$y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = \sum_{j=1}^{m} w_j \phi_j(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{x})$$

Особенность выбора базисных функций

- Общего метода выбора базисных функций $\phi_j(\boldsymbol{x})$ — не существует
- Обычно они подбираются из априорных соображений (например, если мы пытаемся восстановить какой-то периодический сигнал, разумно взять функции тригонометрического ряда) или путем использования некоторых «универсальных» базисных функций
- Наиболее распространенными базисными функциями являются
  - $\phi(\boldsymbol{x}) = x_k$
  - $\phi(\boldsymbol{x}) = x_{k_1} x_{k_2} \dots x_{k_l}$
  - $\phi(\boldsymbol{x}) = \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0\|^p), \ \ \gamma, p > 0.$
- Метод построения линейной регрессии (настройки весов $\boldsymbol{w}$) не зависит от выбора базисных функций

Формализация задачи

- Пусть $S(t, \hat{t})$ — функция потерь от ошибки в определении регрессионной переменной t
- Необходимо минимизировать потери от ошибок на генеральной совокупности

$$\mathbb{E}S(t, y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w})) = \int\int S(t, y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}))p(\boldsymbol{x}, t)d\boldsymbol{x}dt \to \min_{\boldsymbol{w}}$$

- Дальнейшие рассуждения зависят от вида функции потерь
- Во многих случаях даже не нужно восстанавливать полностью условное распределение $p(t|\boldsymbol{x})$

Важная теорема

- Теорема. Пусть функция потерь имеет вид
  - $S(t,\hat{t}) = (t-\hat{t})^2$ — «Потери старушки»;
  - $S(t,\hat{t}) = |t-\hat{t}|$ — «Потери олигарха»;
  - $S(t,\hat{t}) = \delta^{-1}(t-\hat{t})$ — «Потери инвалида».

  Тогда величиной, минимизирующей функцию $\mathbb{E}S(t, y(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}))$, является следующая
  - $y(\boldsymbol{x}) = \mathbb{E}p(t|\boldsymbol{x})$;
  - $y(\boldsymbol{x}) = \mathrm{med}\ p(t|\boldsymbol{x})$;
  - $y(\boldsymbol{x}) = \mathrm{mod}\ p(t|\boldsymbol{x}) = \arg\max_t p(t|\boldsymbol{x})$.
- В зависимости от выбранной системы предпочтений, мы будем пытаться оценивать тот или иной функционал от апостериорного распределения вместо того, чтобы оценивать его самого

План лекции

Минимизация невязки

- Наиболее часто используемой функцией потерь является квадратичная $S(t,\hat{t}) = (t-\hat{t})^2$
- Значение регрессионной функции на обучающей выборке в матричном виде может быть записано как $\boldsymbol{y} = \Phi\boldsymbol{w}$, где $\Phi = (\phi_{ij}) = (\phi_j(\boldsymbol{x}_i)) \in \mathbb{R}^{n\times m}$
- Таким образом, приходим к следующей задаче

$$\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{t}\|^2 = \|\Phi\boldsymbol{w}-\boldsymbol{t}\|^2 \to \min_{\boldsymbol{w}}$$

Взяв производную по $\boldsymbol{w}$ и приравняв ее к нулю, получаем

$$\frac{\partial\|\Phi\boldsymbol{w}-\boldsymbol{t}\|^2}{\partial\boldsymbol{w}} = \frac{\partial[\boldsymbol{w}^T\Phi^T\Phi\boldsymbol{w} - 2\boldsymbol{w}^T\Phi^T\boldsymbol{t} + \boldsymbol{t}^T\boldsymbol{t}]}{\partial\boldsymbol{w}} =$$

$$= 2\Phi^T\Phi\boldsymbol{w} - 2\Phi^T\boldsymbol{t} = 0$$

$$\boldsymbol{w} = (\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T\boldsymbol{t}$$

Регуляризация задачи

- Заметим, что формула для весов линейной регрессии представляет собой псевдорешение уравнения $\Phi \boldsymbol{w} = \boldsymbol{t}$
- Матрица $\Phi^T \Phi \in \mathbb{R}^{m \times m}$ вырождена (Упр.)при $m > n$
- Регуляризуя вырожденную матрицу, получаем

$$\boldsymbol{w} = \left(\Phi^T \Phi + \lambda I\right)^{-1} \Phi^T \boldsymbol{t}$$

- Отсюда формула для прогноза объектов обучающей выборки по их правильным значениям

$$\hat{\boldsymbol{t}} = \boldsymbol{y} = \Phi \left(\Phi^T \Phi + \lambda I\right)^{-1} \Phi^T \boldsymbol{t} = H \boldsymbol{t}$$

С историческим обозначением прогноза — навешиванием шляпки связано неформальное название матрицы H, по-английски звучащее как hat-matrix

Особенности квадратичной функции потерь

- Достоинства
  - Квадратичная функция потерь гладкая (непрерывная и дифференцируемая)
  - Решение может быть получено в явном виде
  - Существует простая вероятностная интерпретация прогноза и функции потерь
- Недостатки
  - Решение неустойчиво (не робастно) относительно даже малого количества выбросов. Это связано с быстрым возрастанием квадратичной функции потерь при больших отклонениях от нуля
  - Квадратичная функция неприменима к задачам классификации

План лекции

Нормальное распределение ошибок

- Рассмотрим вероятностную постановку задачи восстановления регрессии. Регрессионная переменная t — случайная величина с плотностью распределения $p(t|\boldsymbol{x})$
- В большинстве случаев предполагается, что t распределена нормально относительно некоторого мат. ожидания $y(\boldsymbol{x})$, определяемого точкой $\boldsymbol{x}$

$$t = y(\boldsymbol{x}) + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(\varepsilon|0, 1)$$

- Необходимо найти функцию $y(\boldsymbol{x})$, которую мы можем отождествить с уравнением регрессии
- Предположение о нормальном распределении отклонений можно обосновать ссылкой на центральную предельную теорему

Метод максимального правдоподобия для регрессии

- Используем ММП (не путать с одноименной кафедрой) для поиска $y(\boldsymbol{x})$
- Правдоподобие задается следующей формулой

$$p(\boldsymbol{t}|\boldsymbol{y}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(t_i - y_i)^2}{2}\right) \to \max$$

- Взяв логарифм и отбросив члены, не влияющие на положение максимума, получим

$$\sum_{i=1}^{n} (t_i - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} (t_i - \boldsymbol{w}^T \phi(\boldsymbol{x}_i))^2 \to \min_{\boldsymbol{w}}$$

- Таким образом, применение метода максимального правдоподобия в предположении о нормальности отклонений эквивалентно методу наименьших квадратов

Вероятностный смысл регуляризации

- Теперь будем максимизировать не правдоподобие, а апостериорную вероятность
- По формуле условной вероятности

$$p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{t}, X) = \frac{p(\boldsymbol{t}|X, \boldsymbol{w})p(\boldsymbol{w})}{p(\boldsymbol{t}, X)} \to \max_{\boldsymbol{w}},$$

  знаменатель не зависит от $\boldsymbol{w}$, поэтому им можно пренебречь
- Пусть $p(\boldsymbol{w}) \sim \mathcal{N}\left(\boldsymbol{w}\,\middle|\,\boldsymbol{0}, \left(\lambda^{-1}\right) I\right)$. Тогда

$$p(\boldsymbol{w}|\boldsymbol{t}, X) \propto \frac{\lambda^{m/2}}{\left(\sqrt{2\pi}\right)^{m+n}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\|\Phi\boldsymbol{w} - \boldsymbol{t}\|^2 + \lambda\|\boldsymbol{w}\|^2\right)\right)$$

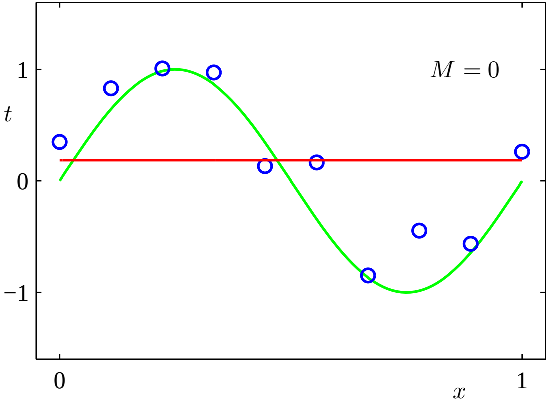
- Логарифмируя и приравнивая производную по $\boldsymbol{w}$ к нулю, получаем

$$\boldsymbol{w} = (\Phi^T\Phi + \lambda I)^{-1}\Phi^T\boldsymbol{t}$$

- Регуляризация эквивалентна введению априорного распределения, поощряющего небольшие веса

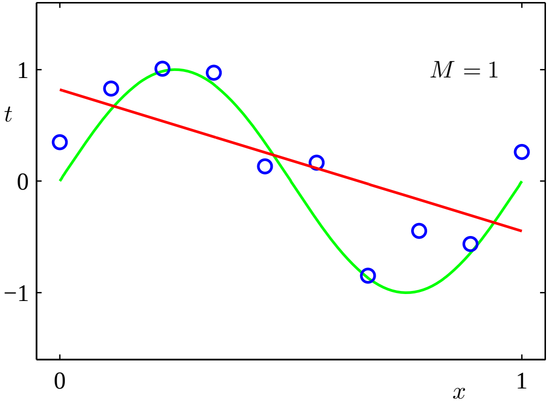
Зачем нужна реугляризация весов

Рассмотрим задачу восстановления регрессии с полиномиальными базисными функциями: $x \in \mathbb{R}$, $\phi_j(x) = x^j$, $j = 0, \ldots, M$



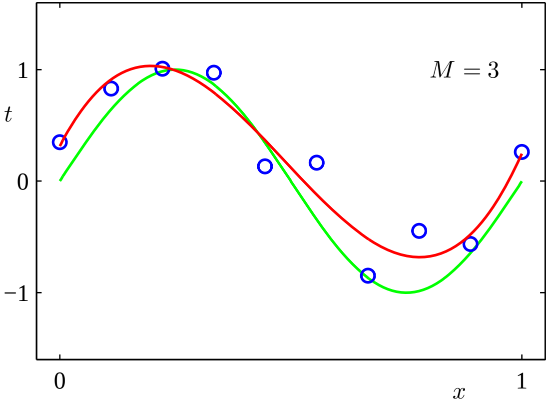
Зачем нужна реугляризация весов

Рассмотрим задачу восстановления регрессии с полиномиальными базисными функциями: $x \in \mathbb{R}$, $\phi_j(x) = x^j$, $j = 0, \ldots, M$



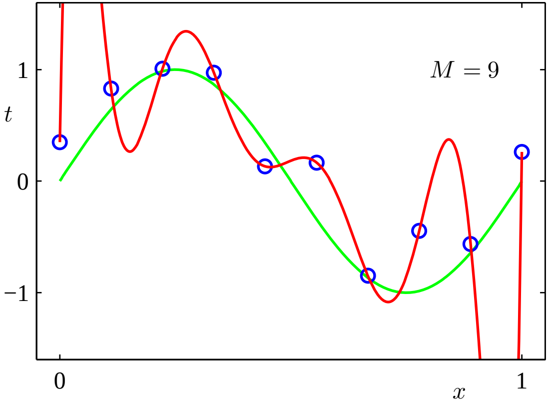
Зачем нужна реуглряризация весов

Рассмотрим задачу восстановления регрессии с полиномиальными базисными функциями: $x \in \mathbb{R}$, $\phi_j(x) = x^j$, $j = 0, \ldots, M$



Зачем нужна реугляризация весов

Рассмотрим задачу восстановления регрессии с полиномиальными базисными функциями: $x \in \mathbb{R}$, $\phi_j(x) = x^j$, $j = 0, \dots, M$



Значения наиболее правдоподобных весов

weight	$M=0$	$M=1$	$M=3$	$M=9$
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

Таблица: Значения наиболее правдоподобных весов в зависимости от степени полинома. С увеличением степени, абсолютные значения весов быстро растут

План лекции

Особенности задачи классификации

- Рассмотрим задачу классификации на два класса $t \in \{-1, +1\}$
- Ее можно свести к задаче регрессии, например, следующим образом

$$\hat{t}(\boldsymbol{x}) = \operatorname{sign}(y(\boldsymbol{x})) = \operatorname{sign} \sum_{j=1}^{m} w_j \phi_j(\boldsymbol{x})$$

- Возникает вопрос: что использовать в качестве значений регрессионной переменной на этапе обучения?
- Наиболее распространенный подход заключается в использовании значения $+\infty$ для $t = +1$ и $-\infty$ для $t = -1$
- Геометрический смысл: чем дальше от нуля значение $y(\boldsymbol{x})$, тем увереннее мы в классификации объекта $\boldsymbol{x}$

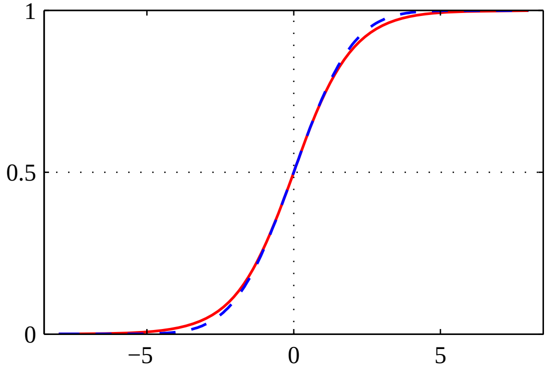
Правдоподобие правильной классификации

- Метод наименьших квадратов, очевидно, неприменим при таком подходе
- Воспользуемся вероятностной постановкой для выписывания функционала качества
- Определим правдоподобие классификации следующим образом

$$p(t|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = \frac{1}{1 + \exp(-ty(\boldsymbol{x}))}$$

- Это логистическая функция. Легко показать, что $\sum_t p(t|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) = 1$ и $p(t|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) > 0$, а, значит, она является функцией правдоподобия

Функционал качества в логистической регрессии



- Правдоподобие правильной классификации всей выборки имеет вид

$$p(\boldsymbol{t}|X,\boldsymbol{w}) = \prod_{i=1}^{n} p(t_i|\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{w}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{1+\exp\left(-t_i\sum_{j=1}^{m} w_j\phi_j(\boldsymbol{x}_i)\right)}$$

План лекции

Особенности функции правдоподобия классификации

- Приравнивание градиента логарифма правдоподобия к нулю приводит к трансцендентным уравнениям, которые неразрешимы аналитически
- Легко показать, что гессиан логарифма правдоподобия неположительно определен

$$\frac{\partial^2 \log p(t|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^2} \leq 0$$

- Это означает, что логарифм функции правдоподобия является вогнутым.
- Логарифм правдоподобия обучающей выборки $L(\boldsymbol{w}) = \log p(\boldsymbol{t}|X, \boldsymbol{w})$, являющийся суммой вогнутых функций, также вогнут, а, значит, имеет единственный максимум

Метод оптимизации Ньютона

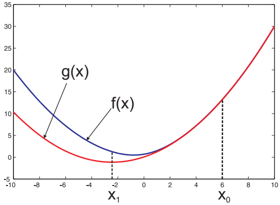
Основная идея метода Ньютона — это приближение в заданной точке оптимизируемой функции параболой и выбор минимума этой параболы в качестве следующей точки итерационного процесса:

$$f(\boldsymbol{x}) \to \min_{\boldsymbol{w}}$$

$$f(\boldsymbol{x}) \simeq g(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_0) + (\nabla f(\boldsymbol{x}_0))^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)^T(\nabla\nabla f(\boldsymbol{x}_0))(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$$

$$\nabla g(\boldsymbol{x}_*) = \nabla f(\boldsymbol{x}_0) + (\nabla\nabla f(\boldsymbol{x}_0))(\boldsymbol{x}_* - \boldsymbol{x}_0) = 0 \Rightarrow \boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{x}_0 - (\nabla\nabla f(\boldsymbol{x}_0))^{-1}(\nabla f(\boldsymbol{x}_0))$$

Пример. Функция $f(x) = \log(1+\exp(x)) + \frac{x^2}{5}$.
$x_0 = 6,\ x_1 = -2.4418.$



Итеративная минимизация логарифма правдоподобия

- Так как прямая минимизация правдоподобия невозможна, воспользуемся итерационным методом Ньютона
- Обоснованием корректности использования метода Ньютона является унимодальность оптимизируемой функции $L(\boldsymbol{w})$ и ее гладкость во всем пространстве весов
- Формула пересчета в методе Ньютона

$$\boldsymbol{w}^{new} = \boldsymbol{w}^{old} - H^{-1}\nabla L(\boldsymbol{w}),$$

где $H = \nabla\nabla L(\boldsymbol{w})$ — гессиан логарифма правдоподобия обучающей выборки

Формулы пересчета

Обозначим $s_i = \frac{1}{1+\exp(t_i y_i)}$, тогда:

$$\nabla L(\boldsymbol{w}) = -\Phi^T \operatorname{diag}(\boldsymbol{t})\boldsymbol{s}, \quad \nabla\nabla L(\boldsymbol{w}) = \Phi^T R \Phi$$

$$R = \begin{pmatrix} s_1(1-s_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s_2(1-s_2) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & s_n(1-s_n) \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{w}^{new} = \boldsymbol{w}^{old} + (\Phi^T R \Phi)^{-1} \Phi^T \operatorname{diag}(\boldsymbol{t})\boldsymbol{s} =$$
$$(\Phi^T R \Phi)^{-1} \left(\Phi^T R \Phi \boldsymbol{w}^{old} + \Phi^T R R^{-1} \operatorname{diag}(\boldsymbol{t})\boldsymbol{s} \right) = (\Phi^T R \Phi)^{-1} \Phi^T R \boldsymbol{z},$$

где $\boldsymbol{z} = \Phi \boldsymbol{w}^{old} + R^{-1} \operatorname{diag}(\boldsymbol{t})\boldsymbol{s}$

Название метода (метод наименьших квадратов с итеративно пересчитываемыми весами) связано с тем, что последняя формула является формулой для взвешенного МНК (веса задаются диагональной матрицей R), причем на каждой итерации веса корректируются

Заключительные замечания

- На практике матрица $\Phi^T R \Phi$ часто бывает вырождена (всегда при $m > n$), поэтому обычно прибегают к регуляризации матрицы $(\Phi^T R \Phi + \lambda I)$
- !! Параметр регуляризации λ является структурным параметром!!
- !! Базисные функции $\phi_j(\boldsymbol{x})$, а значит и матрица Φ являются структурными параметрами!!
- С поиском методов автоматического выбора базисных функций связана одна из наиболее интригующих проблем современного машинного обучения