

Многомерная линейная регрессия. Метод главных компонент

Воронцов Константин Вячеславович

vokov@forecsys.ru

<http://www.MachineLearning.ru/wiki?title=User:Vokov>

Этот курс доступен на странице вики-ресурса

<http://www.MachineLearning.ru/wiki>

«Машинное обучение (курс лекций, К.В.Воронцов)»

Видеолекции: <http://shad.yandex.ru/lectures>

1 Многомерная линейная регрессия

- Метод наименьших квадратов
- Многомерная линейная регрессия
- Сингулярное разложение

2 Регуляризация

- L_2 -регуляризация: гребневая регрессия
- L_1 -регуляризация: лассо Тибширани
- Негладкие регуляризаторы

3 Метод главных компонент

- Постановка задачи
- Основная теорема
- Приложения метода главных компонент

Метод наименьших квадратов

- X — объекты (часто \mathbb{R}^n); Y — ответы (часто \mathbb{R} , реже \mathbb{R}^m);
 $X^\ell = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ — обучающая выборка;
 $y_i = y(x_i)$, $y: X \rightarrow Y$ — неизвестная зависимость;
- $a(x) = f(x, \alpha)$ — модель зависимости,
 $\alpha \in \mathbb{R}^p$ — вектор параметров модели.
- Метод наименьших квадратов (МНК):

$$Q(\alpha, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} w_i (f(x_i, \alpha) - y_i)^2 \rightarrow \min_{\alpha}$$

где w_i — вес, степень важности i -го объекта.

$Q(\alpha^*, X^\ell)$ — остаточная сумма квадратов
 (residual sum of squares, RSS).

Метод максимума правдоподобия

Модель данных с некоррелированным гауссовским шумом:

$$y(x_i) = f(x_i, \alpha) + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_i^2), \quad i = 1, \dots, \ell.$$

Метод максимума правдоподобия (ММП):

$$L(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_\ell | \alpha) = \prod_{i=1}^{\ell} \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_i^2} \varepsilon_i^2\right) \rightarrow \max_{\alpha};$$

$$-\ln L(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_\ell | \alpha) = \text{const}(\alpha) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{1}{\sigma_i^2} (f(x_i, \alpha) - y_i)^2 \rightarrow \min_{\alpha};$$

Теорема

Постановки МНК и ММП, совпадают, причём веса объектов обратно пропорциональны дисперсии шума, $w_i = \sigma_i^{-2}$.

Многомерная линейная регрессия

$f_1(x), \dots, f_n(x)$ — числовые признаки;

Модель многомерной линейной регрессии:

$$f(x, \alpha) = \sum_{j=1}^n \alpha_j f_j(x), \quad \alpha \in \mathbb{R}^n.$$

Матричные обозначения:

$$F_{\ell \times n} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_\ell) & \dots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix}, \quad y_{\ell \times 1} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_\ell \end{pmatrix}, \quad \alpha_{n \times 1} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Функционал квадрата ошибки:

$$Q(\alpha, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} (f(x_i, \alpha) - y_i)^2 = \|F\alpha - y\|^2 \rightarrow \min_{\alpha}.$$

Нормальная система уравнений

Необходимое условие минимума в матричном виде:

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha}(\alpha) = 2F^T(F\alpha - y) = 0,$$

откуда следует *нормальная система* задачи МНК:

$$F^T F \alpha = F^T y,$$

где $F^T F$ — матрица размера $n \times n$.

Решение системы: $\alpha^* = (F^T F)^{-1} F^T y = F^+ y$.

Значение функционала: $Q(\alpha^*) = \|P_F y - y\|^2$,

где $P_F = FF^+ = F(F^T F)^{-1} F^T$ — проекционная матрица.

Геометрическая интерпретация МНК

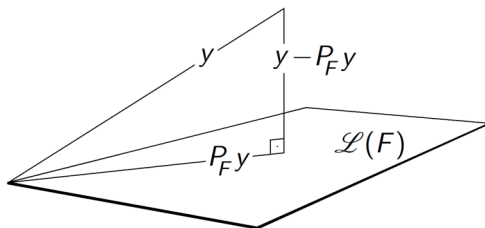
Линейная оболочка столбцов матрицы $F = (f_1, \dots, f_n)$, $f_j \in \mathbb{R}^\ell$:

$$\mathcal{L}(F) = \left\{ \sum_{j=1}^n \alpha_j f_j \mid \alpha \in \mathbb{R}^n \right\}$$

$P_F = F(F^T F)^{-1} F^T$ — проекционная матрица

$P_F y$ — проекция вектора $y \in \mathbb{R}^\ell$ на подпространство $\mathcal{L}(F)$

$(I_\ell - P_F)y$ — проекция y на его ортогональное дополнение



МНК — это опускание перпендикуляра в \mathbb{R}^ℓ из y на $\mathcal{L}(F)$

Сингулярное разложение

Произвольная $\ell \times n$ -матрица представима в виде *сингулярного разложения* (singular value decomposition, SVD):

$$F = VDU^T.$$

Основные свойства сингулярного разложения:

- 1 $\ell \times n$ -матрица $V = (v_1, \dots, v_n)$ ортогональна, $V^T V = I_n$, столбцы v_j — собственные векторы матрицы FF^T ;
- 2 $n \times n$ -матрица $U = (u_1, \dots, u_n)$ ортогональна, $U^T U = I_n$, столбцы u_j — собственные векторы матрицы $F^T F$;
- 3 $n \times n$ -матрица D диагональна, $D = \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n})$, $\lambda_j \geq 0$ — собственные значения матриц $F^T F$ и FF^T .

Решение МНК через сингулярное разложение

Псевдообратная F^+ , вектор МНК-решения α^* ,
 МНК-аппроксимация целевого вектора $F\alpha^*$:

$$F^+ = (UDV^T VDU^T)^{-1}UDV^T = UD^{-1}V^T = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j v_j^T;$$

$$\alpha^* = F^+ y = UD^{-1}V^T y = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j (v_j^T y);$$

$$F\alpha^* = P_F y = (VDU^T)UD^{-1}V^T y = VV^T y = \sum_{j=1}^n v_j (v_j^T y);$$

$$\|\alpha^*\|^2 = \|UD^{-1}V^T y\|^2 = \|D^{-1}V^T y\|^2 = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\lambda_j} (v_j^T y)^2.$$

Проблема мультиколлинеарности

Если $\exists \gamma \in \mathbb{R}^n: F\gamma \approx 0$, то некоторые λ_j близки к нулю.

Число обусловленности $n \times n$ -матрицы S :

$$\mu(S) = \|S\| \|S^{-1}\| = \frac{\max_{u: \|u\|=1} \|Su\|}{\min_{u: \|u\|=1} \|Su\|} = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}},$$

При умножении обратной матрицы на вектор, $z = S^{-1}u$, относительная погрешность усиливается в $\mu(S)$ раз:

$$\frac{\|\delta z\|}{\|z\|} \leq \mu(S) \frac{\|\delta u\|}{\|u\|}.$$

Проблема мультиколлинеарности и переобучения

Если матрица $S = F^T F$ плохо обусловлена, то:

- решение неустойчиво и плохо интерпретируемо,
- $\|\alpha^*\|$ велико;
- возникает переобучение:
на обучении $Q(\alpha^*, X^\ell) = \|F\alpha^* - y\|^2$ малó;
на контроле $Q(\alpha^*, X^k) = \|F'\alpha^* - y'\|^2$ велико;

Стратегии устранения мультиколлинеарности и переобучения:

- регуляризация: $\|\alpha\| \rightarrow \min$;
- отбор признаков: $f_1, \dots, f_n \rightarrow f_{j_1}, \dots, f_{j_m}, \quad m \ll n$.
- преобразование признаков: $f_1, \dots, f_n \rightarrow g_1, \dots, g_m, \quad m \ll n$;

Регуляризация (гребневая регрессия)

Штраф за увеличение нормы вектора весов $\|\alpha\|$:

$$Q_\tau(\alpha) = \|F\alpha - y\|^2 + \frac{1}{\sigma}\|\alpha\|^2,$$

где $\tau = \frac{1}{\sigma}$ — неотрицательный *параметр регуляризации*.

Вероятностная интерпретация: априорное распределение вектора α — гауссовское с ковариационной матрицей σI_n .

Модифицированное МНК-решение (τI_n — «гребень»):

$$\alpha_\tau^* = (F^T F + \tau I_n)^{-1} F^T y.$$

Преимущество сингулярного разложения:

можно подбирать параметр τ , вычислив SVD только один раз.

Регуляризованный МНК через сингулярное разложение

Вектор регуляризованного МНК-решения α_τ^*
 и МНК-аппроксимация целевого вектора $F\alpha_\tau^*$:

$$\alpha_\tau^* = U(D^2 + \tau I_n)^{-1} D V^T y = \sum_{j=1}^n \frac{\sqrt{\lambda_j}}{\lambda_j + \tau} u_j (v_j^T y);$$

$$F\alpha_\tau^* = V D U^T \alpha_\tau^* = V \operatorname{diag}\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau}\right) V^T y = \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau} v_j (v_j^T y);$$

$$\|\alpha_\tau^*\|^2 = \|(D^2 + \tau I_n)^{-1} D V^T y\|^2 = \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_j}{(\lambda_j + \tau)^2} (v_j^T y)^2.$$

$F\alpha_\tau^* \neq F\alpha^*$, но зато решение становится гораздо устойчивее.

Выбор параметра регуляризации τ

Контрольная выборка: $X^k = (x'_i, y'_i)_{i=1}^k$;

$$F'_{k \times n} = \begin{pmatrix} f_1(x'_1) & \dots & f_n(x'_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x'_k) & \dots & f_n(x'_k) \end{pmatrix}, \quad y'_{k \times 1} = \begin{pmatrix} y'_1 \\ \dots \\ y'_k \end{pmatrix}.$$

Вычисление функционала Q на контрольных данных T раз потребует $O(kn^2 + knT)$ операций:

$$Q(\alpha_\tau^*, X^k) = \|F' \alpha_\tau^* - y'\|^2 = \left\| \underbrace{F' U}_{k \times n} \operatorname{diag} \left(\frac{\sqrt{\lambda_j}}{\lambda_j + \tau} \right) \underbrace{V^T y}_{n \times 1} - y' \right\|^2.$$

Зависимость $Q(\tau)$ обычно имеет характерный минимум.

Регуляризация сокращает «эффективную размерность»

Сжатие (shrinkage) или сокращение весов (weight decay):

$$\|\alpha_\tau^*\|^2 = \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_j}{(\lambda_j + \tau)^2} (v_j^T y)^2 < \|\alpha^*\|^2 = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\lambda_j} (v_j^T y)^2.$$

Почему говорят о сокращении эффективной размерности?

Роль размерности играет след проекционной матрицы:

$$\text{tr } F(F^T F)^{-1} F^T = \text{tr } (F^T F)^{-1} F^T F = \text{tr } I_n = n.$$

При использовании регуляризации:

$$\text{tr } F(F^T F + \tau I_n)^{-1} F^T = \text{tr } \text{diag} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau} \right) = \sum_{j=1}^n \frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau} < n.$$

Регуляризация для отбора признаков

LASSO — Least Absolute Shrinkage and Selection Operator

$$\|F\alpha - y\|^2 + \mu \sum_{j=1}^n |\alpha_j| \rightarrow \min_{\alpha} \iff \begin{cases} \|F\alpha - y\|^2 \rightarrow \min_{\alpha} \\ \sum_{j=1}^n |\alpha_j| \leq \varkappa; \end{cases}$$

После замены переменных

$$\begin{cases} \alpha_j = \alpha_j^+ - \alpha_j^-; \\ |\alpha_j| = \alpha_j^+ + \alpha_j^-; \end{cases} \quad \alpha_j^+ \geq 0; \quad \alpha_j^- \geq 0.$$

ограничения принимают канонический вид:

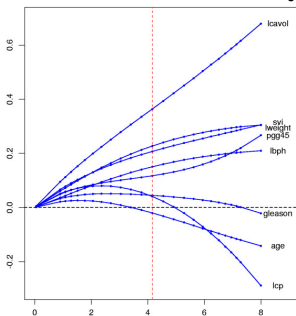
$$\sum_{j=1}^n \alpha_j^+ + \alpha_j^- \leq \varkappa; \quad \alpha_j^+ \geq 0; \quad \alpha_j^- \geq 0.$$

Чем меньше \varkappa , тем больше j таких, что $\alpha_j^+ = \alpha_j^- = 0$.

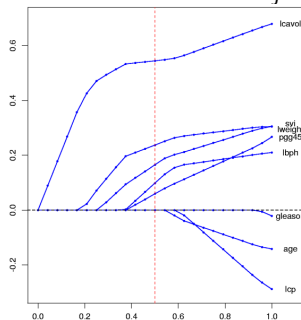
Сравнение L_2 и L_1 регуляризации

Зависимость весов α_j от коэффициента $\frac{1}{\mu}$

L_2 регуляризатор: $\mu \sum_j \alpha_j^2$



L_1 регуляризатор: $\mu \sum_j |\alpha_j|$



Задача классификации UCI: prostate cancer (диагностика рака)

Другие негладкие регуляризаторы

Общий вид регуляризаторов (μ — параметр селективности):

$$\frac{1}{2} \|F\alpha - y\|^2 + \tau \sum_{j=1}^n R_{\mu}(\alpha_j) \rightarrow \min_{\alpha}.$$

Elastic Net:

$$R_{\mu}(\alpha) = \mu|\alpha| + \alpha^2$$

Support Features Machine (SFM):

$$R_{\mu}(\alpha) = \begin{cases} 2\mu|\alpha|, & |\alpha| \leq \mu; \\ \mu^2 + \alpha^2, & |\alpha| \geq \mu; \end{cases}$$

Relevance Features Machine (RFM):

$$R_{\mu}(\alpha) = \ln(\mu\alpha^2 + 1)$$

Метод главных компонент: постановка задачи

$f_1(x), \dots, f_n(x)$ — исходные числовые признаки;
 $g_1(x), \dots, g_m(x)$ — новые числовые признаки, $m \leq n$;

Требование: старые признаки должны линейно
 восстанавливаться по новым:

$$\hat{f}_j(x) = \sum_{s=1}^m g_s(x) u_{js}, \quad j = 1, \dots, n, \quad \forall x \in X,$$

как можно точнее на обучающей выборке x_1, \dots, x_ℓ :

$$\sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^n (\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i))^2 \rightarrow \min_{\{g_s(x_i)\}, \{u_{js}\}}$$

Матричные обозначения

Матрицы «объекты–признаки», старая и новая:

$$F_{\ell \times n} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \dots & f_n(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_\ell) & \dots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix}; \quad G_{\ell \times m} = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & \dots & g_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ g_1(x_\ell) & \dots & g_m(x_\ell) \end{pmatrix}.$$

Матрица линейного преобразования новых признаков в старые:

$$U_{n \times m} = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{1m} \\ \dots & \dots & \dots \\ u_{n1} & \dots & u_{nm} \end{pmatrix}; \quad \hat{F} = GU^T \overset{\text{ХОТИМ}}{\approx} F.$$

Найти: и новые признаки G , и преобразование U :

$$\sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=1}^n (\hat{f}_j(x_i) - f_j(x_i))^2 = \|GU^T - F\|^2 \rightarrow \min_{G, U},$$

Основная теорема метода главных компонент

Теорема

Если $m \leq \text{rk } F$, то минимум $\|GU^T - F\|^2$ достигается, когда столбцы U — это с.в. матрицы $F^T F$, соответствующие m максимальным с.з. $\lambda_1, \dots, \lambda_m$, а матрица $G = FU$.

При этом:

- 1 матрица U ортонормирована: $U^T U = I_m$;
- 2 матрица G ортогональна: $G^T G = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$;
- 3 $U\Lambda = F^T F U$; $G\Lambda = FF^T G$;
- 4 $\|GU^T - F\|^2 = \|F\|^2 - \text{tr } \Lambda = \sum_{j=m+1}^n \lambda_j$.

Связь с сингулярным разложением

Если взять $m = n$, то:

① $\|GU^T - F\|^2 = 0$;

② представление $\hat{F} = GU^T = F$ точное и совпадает с сингулярным разложением при $G = V\sqrt{\Lambda}$:

$$F = GU^T = V\sqrt{\Lambda}U^T; \quad U^TU = I_m; \quad V^TV = I_m.$$

③ линейное преобразование U работает в обе стороны:

$$F = GU^T; \quad G = FU.$$

Поскольку новые признаки некоррелированы ($G^TG = \Lambda$), преобразование U называется *декоррелирующим* (или преобразованием Карунена–Лоэва).

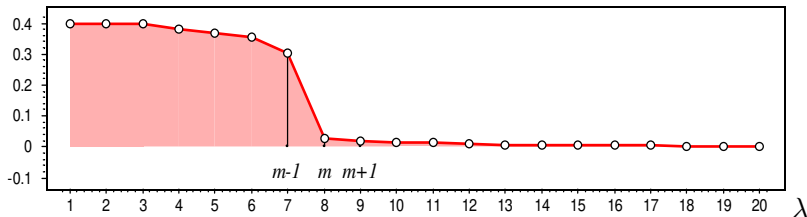
Эффективная размерность выборки

Упорядочим с.з. $F^T F$ по убыванию: $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$.

Эффективная размерность выборки — это наименьшее целое m , при котором

$$E_m = \frac{\|GU^T - F\|^2}{\|F\|^2} = \frac{\lambda_{m+1} + \dots + \lambda_n}{\lambda_1 + \dots + \lambda_n} \leq \varepsilon.$$

Критерий «крутого склона»: находим m : $E_{m-1} \gg E_m$:



Решение задачи НК в новых признаках

Заменим $F_{\ell \cdot n}$ на её приближение $G_{\ell \cdot m} \cdot U^T_{m \cdot n}$, предполагая $m \leq n$:

$$\|G \underbrace{U^T \alpha}_{\beta} - y\|^2 = \|G\beta - y\|^2 \rightarrow \min_{\beta}.$$

Связь нового и старого вектора коэффициентов:

$$\beta = U^T \alpha; \quad \alpha = U\beta.$$

Решение задачи наименьших квадратов относительно β (единственное отличие — m слагаемых вместо n):

$$\beta^* = D^{-1} V^T y; \quad \alpha^* = U D^{-1} V^T y = \sum_{j=1}^m \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j (v_j^T y);$$

$$G\beta^* = V V^T y = \sum_{j=1}^m v_j (v_j^T y);$$

Обобщение. Спектральный метод наименьших квадратов

1. Построить SVD-разложение: $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_m \geq \lambda_{m+1} \geq \dots \geq \lambda_n$.
2. Игнорировать $n - m$ наименьших с. з. или иным способом отделить с. з. от нуля: $\lambda'_j := f(\lambda_j)$.

Частные случаи:

- $\lambda'_j := \lambda_j + \tau$ — гребневая регрессия
- $\lambda'_j := \lambda_j [j \leq m]$ — метод главных компонент

3. Применить формулы SVD для модификации МНК-решения:

$$\alpha^* = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j (v_j^T y) \quad \longrightarrow \quad \alpha^* = \sum_{j=1}^m \frac{\sqrt{\lambda_j}}{\lambda'_j} u_j (v_j^T y)$$

$$F\alpha^* = \sum_{j=1}^n v_j (v_j^T y) \quad \longrightarrow \quad F\alpha^* = \sum_{j=1}^m \frac{\lambda_j}{\lambda'_j} v_j (v_j^T y)$$

Обобщение. Задачи низкорангового матричного разложения

- Понижение размерности в задачах регрессии
- Понижение размерности в задачах классификации
- Формирование сжатого представления данных

Дано: матрица $Z = \|z_{ij}\|_{n \times m}$, $(i, j) \in \Omega \subseteq \{1..n\} \times \{1..m\}$

Найти: матрицы $X = \|x_{it}\|_{n \times k}$ и $Y = \|y_{tj}\|_{k \times m}$ такие, что

$$\|Z - XY\|^2 = \sum_{(i,j) \in \Omega} \left(z_{ij} - \sum_t x_{it} y_{tj} \right)^2 \rightarrow \min_{X, Y}$$

Дополнительные ограничения, вынуждающие отказаться от SVD:

- неквадратичная функция потерь
- неотрицательное матричное разложение: $x_{it} \geq 0$, $y_{tj} \geq 0$
- разреженные данные: $|\Omega| \ll nm$

Примеры прикладных задач матричного разложения

- 1 **Выявление интересов в рекомендательных системах (recommender systems, collaborative filtering)**

$$z_{iu} = \sum_t p_{it} q_{tu}$$

дано: z_{iu} — рейтинги товаров i , поставленные пользователем u ;

найти: p_{it} — профиль интересов товара i ;

q_{tu} — профиль интересов пользователя u .

- 2 **Разделение смеси химических веществ по данным жидкостной хроматографии**

$$z_{t\lambda} = \sum_i x_{ti} y_{i\lambda}$$

дано: $z_{t\lambda}$ — выход сканирующего УФ-детектора;

найти: x_{ti} — хроматограмма i -го вещества, t — время;

$y_{i\lambda}$ — спектр i -го вещества, λ — длина волны.

Примеры прикладных задач матричного разложения

- 3 Латентный семантический анализ коллекций текстов (тематическое моделирование)

$$z_{wd} = \sum_t \varphi_{wt} \theta_{td}$$

дано: $z_{wd} = p(w|d)$ — частоты слов w в документах d ;

найти: $\varphi_{wt} = p(w|t)$ — распределения слов w в темах t ,

$\theta_{td} = p(t|d)$ — распределения тем t в документах d .

- 4 Оценивание экспрессии генов по данным ДНК-микрочипов с учётом кросс-гибридизации

$$z_{pk} = \sum_g a_{pg} c_{gk}$$

дано: z_{pk} — интенсивность свечения p -й пробы на k -м чипе;

найти: a_{pg} — коэффициент сродства p -й пробы g -му гену,

c_{gk} — концентрация g -го гена на k -м чипе.

- Метод наименьших квадратов (МНК)
 - нормальный некоррелированный шум
- Многомерная линейная регрессия
 - через сингулярное разложение
- Гребневая регрессия
 - тоже через сингулярное разложение
- Метод главных компонент
 - тоже через сингулярное разложение
- Негладкие регуляризаторы: Лассо Тибширани, Elastic Net
 - отбор признаков
- Матричные разложения также можно строить методом НК
 - SVD и др. (NNMF, ALS — в следующем семестре)