Линейная регрессия

Регрессия — способ выбрать из семейства функций ту, которая минимизирует функцию потерь. Последняя характеризует насколько сильно пробная функция отклоняется от значений в заданных точках. Если точки получены в эксперименте, они неизбежно содержат ошибку измерений, шум, поэтому разумнее требовать, чтобы функция передавала общую тенденцию, а не точно проходила через все точки. В каком-то смысле регрессия — это «интерполирующая аппроксимация»: мы хотим провести кривую как можно ближе к точкам и при этом сохранить ее максимально простой чтобы уловить общую тенденцию. За баланс между этими противоречивыми желаниями как-раз отвечает функция потерь (в английской литературе «loss function» или «cost function»).

Цель регрессии — найти коэффициенты этой линейной комбинации, и тем самым определить регрессионную функцию (которую также называют *моделью*). Отмечу, что линейную регрессию называют линейной именно из-за линейной комбинации базисных функций — это не связано с самыми базисными функциями (они могут быть линейными или нет).

$$f = \sum_i w_i f_i .$$

Метод наименьших квадратов

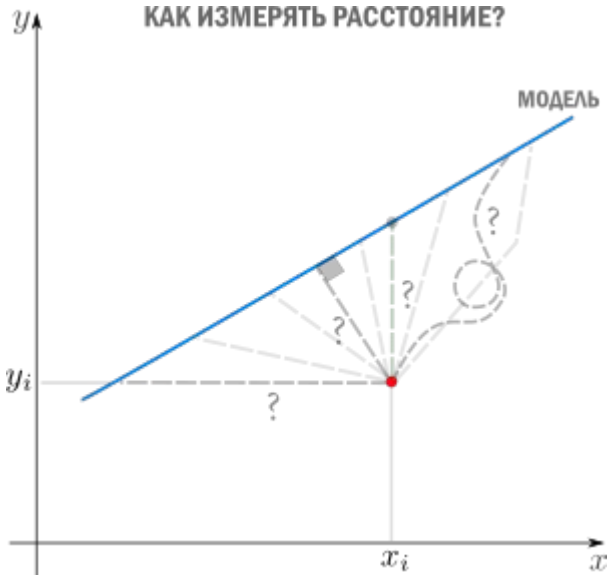
Начнём с простейшего двумерного случая. Пусть нам даны точки на плоскости $\{(x_1, y_1), \cdots, (x_N, y_N)\}$

и мы ищем такую аффинную функцию

$$f(x) = a + b \cdot x,$$

чтобы ее график ближе всего находился к точкам. Таким образом, наш базис состоит из константной функции и линейной .

Как видно из иллюстрации, расстояние от точки до прямой можно понимать по-разному, например геометрически — это длина перпендикуляра. Однако в контексте нашей задачи нам нужно функциональное расстояние, а не геометрическое. Нас интересует разница между экспериментальным значением и предсказанием модели для каждого поэтому измерять нужно вдоль оси .

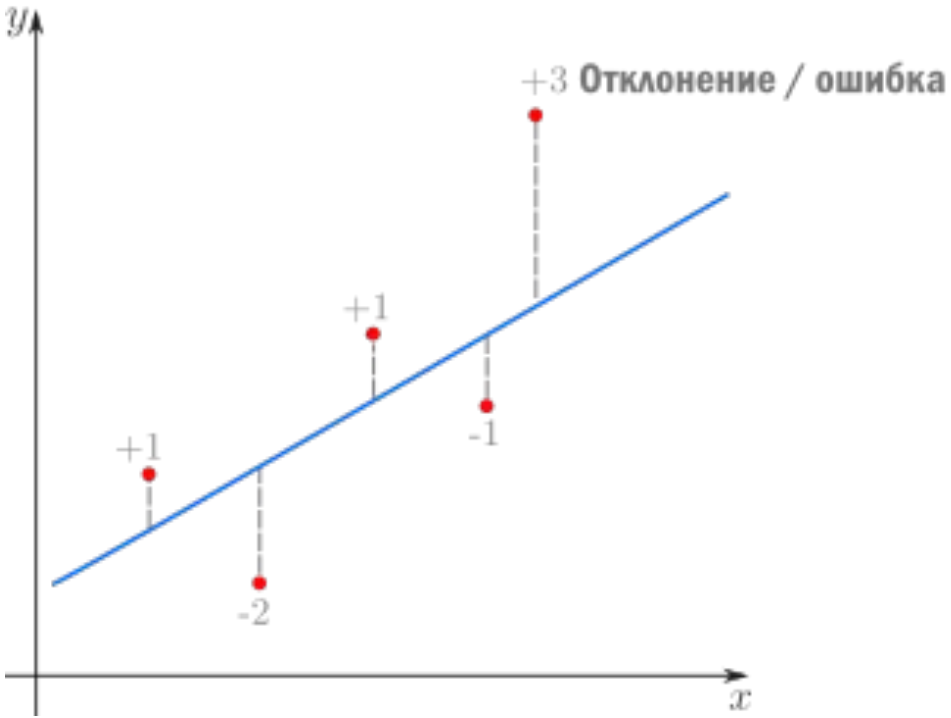


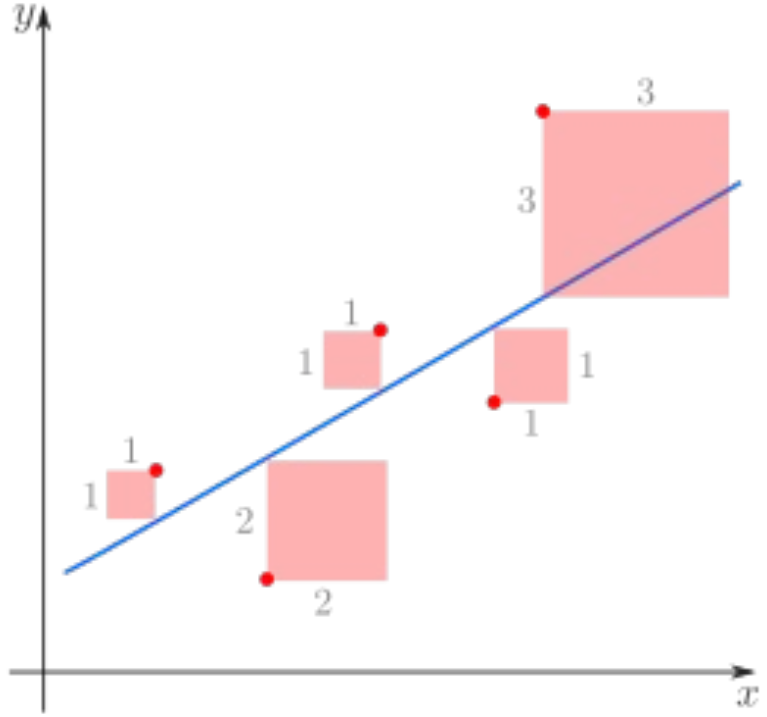
Первое, что приходит в голову, в качестве функции потерь попробовать выражение, зависящее от абсолютных значений разниц $|f(x_i) - y_i|$. Простейший вариант — сумма модулей отклонений $\sum_i |f(x_i) - y_i|$ приводит к Least Absolute Distance (LAD) регрессии.

Впрочем, более популярная функция потерь — сумма квадратов отклонений регрессанта от модели. В англоязычной литературе она носит название Sum of Squared Errors (SSE)

$$\mathrm{SSE}(a,b) = \mathrm{SS}_{res[iduals]} = \sum_{i=1}^{N} \text{отклонение}_i{}^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(x_i))^2 = \sum_{i=1}^{N} (y_i - a - b \cdot x_i)^2,$$

Метод наименьших квадратов (по англ. OLS) — линейная регрессия с в качестве функции потерь.


y
+3 Отклонение / ошибка
+1
+1
-1
-2
x


y
3
3
1
1
1
1
1
2
2
x

Наша задача — найти параметры $\hat{a}$ и $\hat{b}$, минимизирующие SSE(a,b) . Эту функцию иногда называют функцией ошибок, функцией соответствия или функцией потерь.

$$(\hat{a},\hat{b}\ )=\text{argmin}_{a,b}\text{SSE}(a,b).$$

Простейший способ найти — вычислить частные производные по и , приравнять их нулю и решить систему линейных уравнений

$$\frac{\partial}{\partial a}\text{SSE}(a,b) = -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - a - bx_i),$$

$$\frac{\partial}{\partial b}\text{SSE}(a,b) = -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - a - bx_i)x_i.$$

Значения параметров, минимизирующие функцию потерь, удовлетворяют уравнениям

$$0 = -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{a} - \hat{b}x_i),$$

$$0 = -2\sum_{i=1}^{N}(y_i - \hat{a} - \hat{b}x_i)x_i,$$

$$\hat{a} = \frac{\sum_i y_i}{N} - \hat{b}\frac{\sum_i x_i}{N},$$
$$\hat{b} = \frac{\frac{\sum_i x_i y_i}{N} - \frac{\sum_i x_i \sum_i y_i}{N^2}}{\frac{\sum_i x_i^2}{N} - \left(\frac{\sum_i x_i^2}{N}\right)^2}.$$

Полученные формулы можно компактно записать с помощью статистических эстиматоров: среднего $\langle\cdot\rangle$, вариации $\sigma_\cdot$ (стандартного отклонения), ковариации $\sigma(\cdot,\cdot)$ и корреляции $\rho(\cdot,\cdot)$

$$\hat{a} = \langle y\rangle - \hat{b}\langle x\rangle,$$
$$\hat{b} = \frac{\langle xy\rangle - \langle x\rangle\langle y\rangle}{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}.$$

Перепишем $\hat{b}$ как

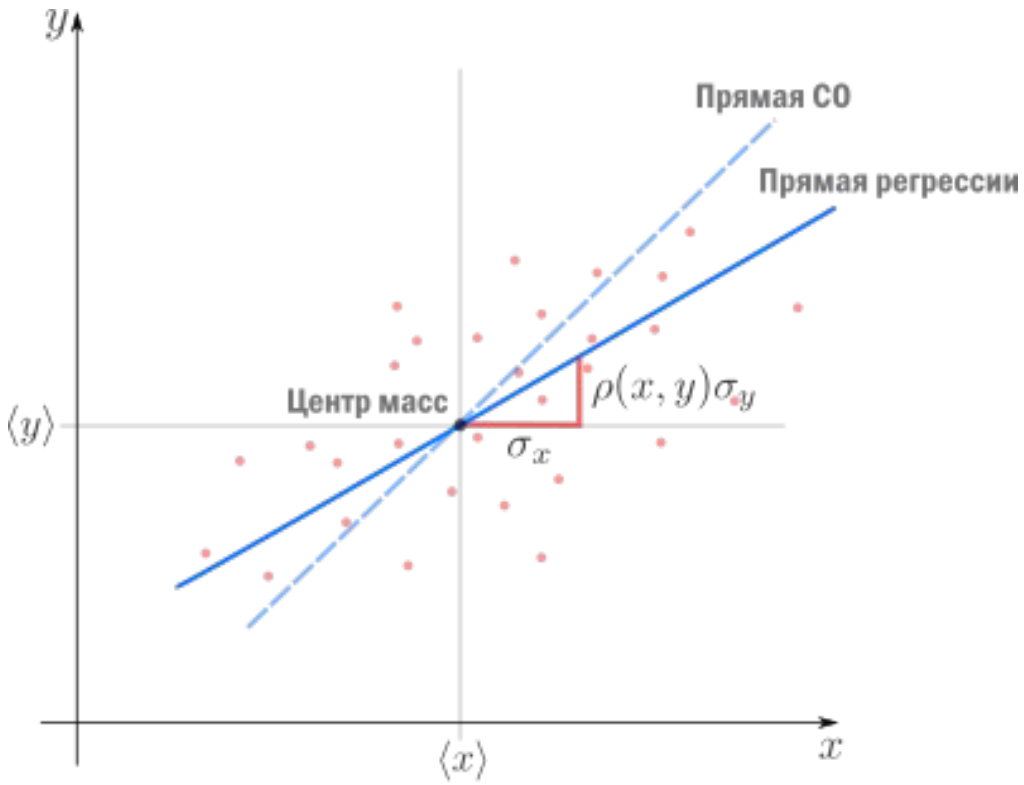
$$\hat{b} = \frac{\sigma(x,y)}{\sigma_x^2},$$

где σ_x это нескорректированное (смещенное) стандартное выборочное отклонение, а $\sigma(x,y)$ — ковариация. Теперь вспомним, что коэффициент корреляции (коэффициент корреляции Пирсона)

$$\rho(x,y) = \frac{\sigma(x,y)}{\sigma_x\sigma_y}$$

и запишем

$$\hat{b} = \rho(x,y)\frac{\sigma_y}{\sigma_x}.$$


y
Прямая СО
Прямая регрессии
Центр масс
$\rho(x,y)\sigma_y$
σ_x
$\langle y \rangle$
$\langle x \rangle$
x

Теперь мы можем оценить все изящество дескриптивной статистики, записав уравнение регрессионной прямой так

$$\boxed{y - \langle y \rangle = \rho(x, y)\frac{\sigma_y}{\sigma_x}(x - \langle x \rangle)}.$$

Во-первых, это уравнение сразу указывает на два свойства регрессионной прямой:

- прямая проходит через центр масс $(\langle x \rangle, \langle y \rangle)$;
- если по оси x за единицу длины выбрать σ_x, а по оси y — σ_y, то угол наклона прямой будет от $-45°$ до $45°$. Это связано с тем, что $-1 \leq \rho(x, y) \leq 1$.

Во-вторых, теперь становится понятно, почему метод регрессии называется именно так. В единицах стандартного отклонения отклоняется от своего среднего значения меньше чем , потому что:

$$|\rho(x, y)| \leq 1$$

Возведя коэффициент корреляции в квадрат, получим коэффициент детерминации $R = \rho^2$. Квадрат этой статистической меры показывает насколько хорошо регрессионная модель описывает данные. R^2, равный 1, означает что функция идеально ложится на все точки — данные идеально скоррелированны. Можно доказать, что R^2 показывает какая доля вариативности в данных объясняется лучшей из линейных моделей. Чтобы понять, что это значит, введем определения

$$\mathrm{Var}_{data} = \frac{1}{N}\sum_i (y_i - \langle y \rangle)^2,$$

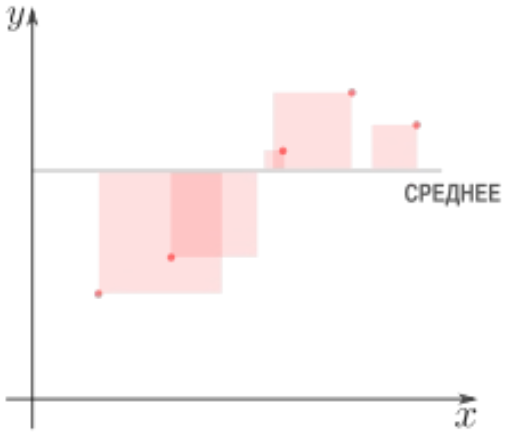
$$\mathrm{Var}_{res} = \frac{1}{N}\sum_i (y_i - \text{модель}(x_i))^2,$$

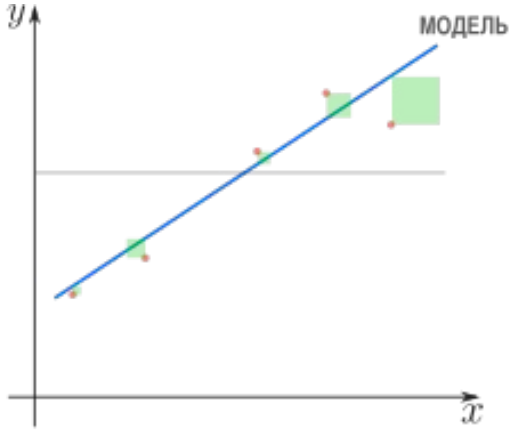
$$\mathrm{Var}_{reg} = \frac{1}{N}\sum_i (\text{модель}(x_i) - \langle y \rangle)^2.$$

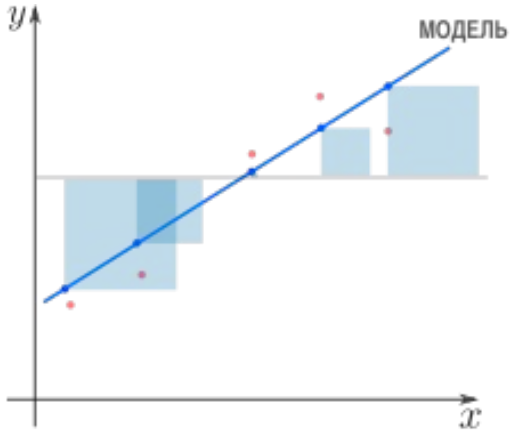
Var_{data} — вариация исходных данных (вариация точек y_i).

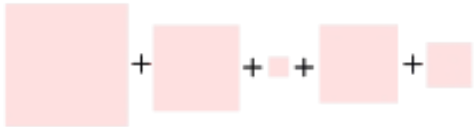
Var_{res} — вариация остатков, то есть вариация отклонений от регрессионной модели — от y_i нужно отнять предсказание модели и найти вариацию.

Var_{reg} — вариация регрессии, то есть вариация предсказаний регрессионной модели в точках x_i (обратите внимание, что среднее предсказаний модели совпадает с $\langle y \rangle$).

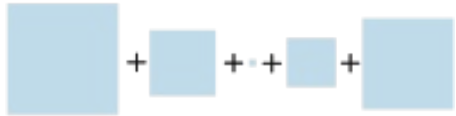






$\mathrm{Var}_{data} =$ 

$\mathrm{Var}_{res} =$ 

$\mathrm{Var}_{reg} =$ 

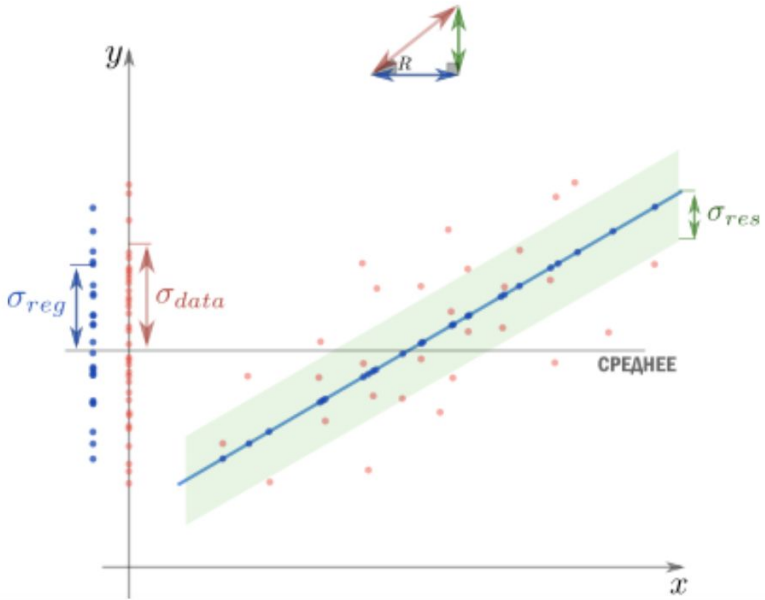
Дело в том, что вариация исходных данных разлагается в сумму двух других вариаций: вариации случайного шума (остатков) и вариации, которая объясняется моделью (регрессии)

$$\boxed{\mathrm{Var}_{data} = \mathrm{Var}_{res} + \mathrm{Var}_{reg}.}$$

или

$$\sigma^2_{data} = \sigma^2_{res} + \sigma^2_{reg}.$$

Как видим, стандартные отклонения образуют прямоугольный треугольник.



Проблема выбора размерности

На практике часто приходится самостоятельно строить модель явления, то есть определяться сколько и каких нужно взять базисных функций. Первый порыв «набрать побольше» может сыграть злую шутку: модель окажется слишком чувствительной к шумам в данных (переобучение). С другой стороны, если излишне ограничить модель, она будет слишком грубой (недообучение).

Есть два способа выйти из ситуации. Первый: последовательно наращивать количество базисных функций, проверять качество регрессии и вовремя остановиться. Или же второй: выбрать функцию потерь, которая определит число степеней свободы автоматически. В качестве критерия успешности регрессии можно использовать коэффициент детерминации, о котором уже упоминалось выше, однако, проблема в том, что R^2 монотонно растет с ростом размерности базиса. Поэтому вводят скорректированный коэффициент

$$\bar{R}^2 = 1 - (1 - R^2)\left[\frac{N-1}{N-(n+1)}\right],$$

где N — размер выборки, n — количество независимых переменных. Следя за $\bar{R}^2$, мы можем вовремя остановиться и перестать добавлять дополнительные степени свободы.

Вторая группа подходов — регуляризации, самые известные из которых Ridge(L_2/гребневая/Тихоновская регуляризация), Lasso(L_1 регуляризация) и Elastic Net(Ridge+Lasso). Главная идея этих методов: модифицировать функцию потерь дополнительными слагаемыми, которые не позволят вектору коэффициентов $\mathbf{w}$ неограниченно расти и тем самым воспрепятствуют переобучению

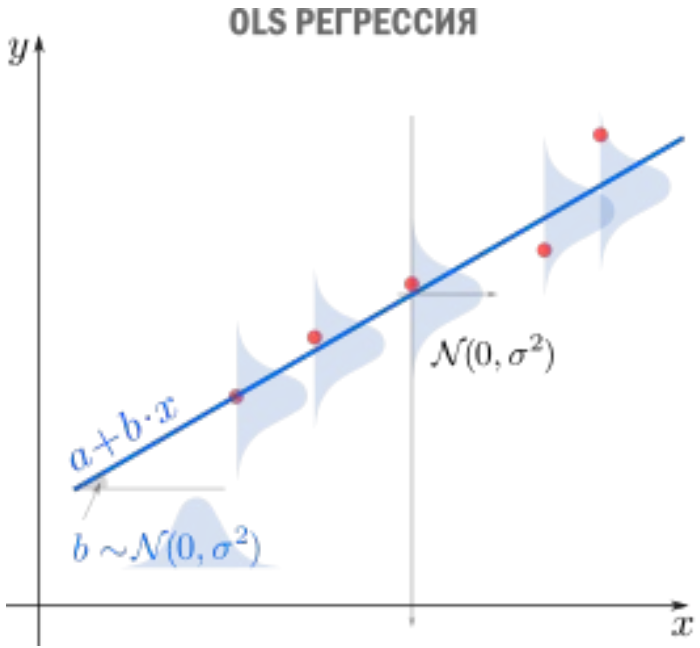
$$E_{\text{Ridge}}(\mathbf{w}) = \text{SSE}(\mathbf{w}) + \alpha \sum_i |w_i|^2 = \text{SSE}(\mathbf{w}) + \alpha \|\mathbf{w}\|_{L_2}^2,$$

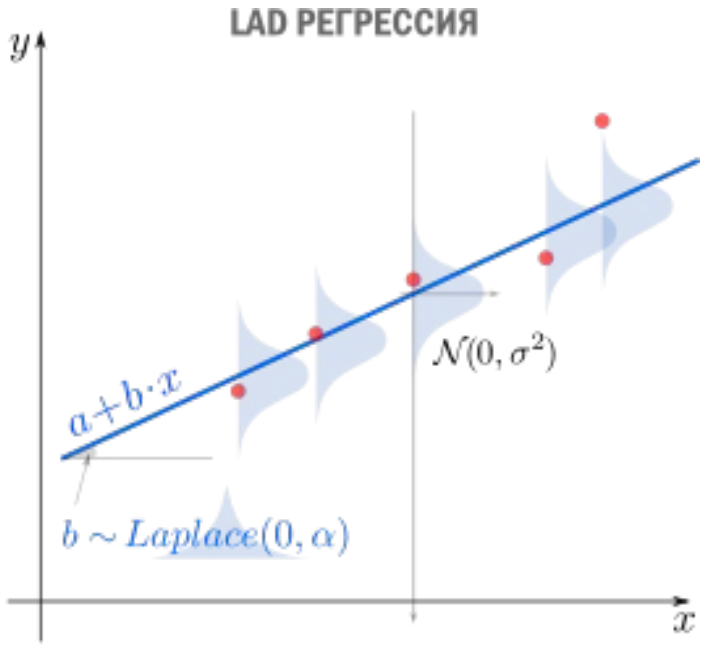
$$E_{\text{Lasso}}(\mathbf{w}) = \text{SSE}(\mathbf{w}) + \beta \sum_i |w_i| = \text{SSE}(\mathbf{w}) + \beta \|\mathbf{w}\|_{L_1},$$

$$E_{\text{EN}}(\mathbf{w}) = \text{SSE}(\mathbf{w}) + \alpha \|\mathbf{w}\|_{L_2}^2 + \beta \|\mathbf{w}\|_{L_1},$$

где α и β — параметры, которые регулируют «силу» регуляризации. Это обширная тема с красивой геометрией, которая заслуживает отдельного рассмотрения. Упомяну кстати, что для случая двух переменных при помощи вероятностной интерпретации можно получить Ridge и Lasso регрессии, удачно выбрав априорное распределения для коэффициента b

$$\text{y} = \text{a} + \text{bx} + \epsilon, \qquad \epsilon \sim \mathcal{N}(0,\, \sigma^2), \qquad \begin{cases} b \sim \mathcal{N}(0,\, \tau^2) & \leftarrow \text{Ridge}, \\ b \sim \text{Laplace}(0,\, \alpha) & \leftarrow \text{Lasso}. \end{cases}$$


OLS РЕГРЕССИЯ
y
x
$a+b\cdot x$
$b \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$
$\mathcal{N}(0, \sigma^2)$


LAD РЕГРЕССИЯ
y
x
$a+b\cdot x$
$b \sim Laplace(0, \alpha)$
$\mathcal{N}(0, \sigma^2)$