SYSTEMY UCZĄCE SIĘ

WYKŁAD 5. UCZENIE SIĘ APROKSYMACJI FUNKCJI – MODELE LINIOWE

Dr hab. inż. Grzegorz Dudek
Wydział Elektryczny
Politechnika Częstochowska

Częstochowa 2014

METODY APROKSYMACJI

Metody aproksymacji pod względem sposobu reprezentacji funkcji aproksymowanej:

- parametryczne, w których hipoteza reprezentowana jest przez wektor liczb rzeczywistych – parametrów modyfikowanych w trakcie uczenia, na podstawie których obliczana jest wartość funkcji dla dowolnego punktu z dziedziny,
- pamięciowe (*memory-based*, *instance-based*, *similarity-based*, *lazy learners*), przechowujące zbiór przykładów uczących i wyznaczające wartość hipotezy na podstawie przykładów najbardziej podobnych do przykładu wejściowego,
- symboliczne, oparte na symbolicznej reprezentacji funkcji, np. w postaci drzew decyzyjnych.

Założenie

- przykłady opisywane są wektorami liczb rzeczywistych (atrybutów) $\mathbf{x} = [1, x_1, x_2, \ldots, x_n]^T$
- hipoteza reprezentowana jest wektorem liczb rzeczywistych (parametrów, wag). W modelu liniowym: $\mathbf{w} = [w_0, w_1, w_2, \ldots, w_n]^T$

Uczenie się

Uczenie się polega na modyfikowaniu wag na podstawie przykładów trenujących.
Cel – zmniejszenie błędu aproksymacji, np.:

$$E(h_w) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x}\in P}(f(\mathbf{x}) - h_w(\mathbf{x}))^2$$

gdzie: $f(\mathbf{x})$ jest wartością funkcji docelowej dla przykładu $\mathbf{x}$, a $h_w(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ jest wartością hipotezy przy wagach $\mathbf{w}$ dla przykładu $\mathbf{x}$.

Ponieważ $f(\mathbf{x})$ jest zwykle nieznana w jej miejsce podstawiamy y ($y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$).

Proces uczenia się często wykorzystuje regułę spadku gradientu (patrz – perceptron).

Gradient $\nabla E(h_{\mathbf{w}}) = \left[\frac{\partial E}{\partial w_0}, \frac{\partial E}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial E}{\partial w_n}\right]$ ze znakiem ujemnym wskazuje kierunek "przesunięcia" wag:

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} - \eta \nabla E(h_{\mathbf{w}})$$
$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta \sum_{\mathbf{x} \in P} (f(\mathbf{x}) - h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})) \nabla_{\mathbf{w}} h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})$$

gdzie $\eta > 0$ jest współczynnikiem uczenia.

Powyższa reguła nosi nazwę uogólnionej reguły delta. Reprezentuje ona ogólny algorytm uczenia się w parametrycznych aproksymatorach funkcji (tryb epokowy – wagi modyfikowane są po każdej epoce). Jego konkretyzacja zależy od funkcji *F*, czyli od charakteru zależności hipotezy od **w**.

Regułę tę można zastosować w trybie inkrementacyjnym (adaptacja wag po prezentacji każdego przykładu): $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta (f(\mathbf{x}) - h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})) \nabla_{\mathbf{w}} h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x})$

APROKSYMATOR LINIOWY (PERCEPTRON)

Hipoteza ma postać:

$$h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T\mathbf{x} = \sum_{i=0}^{n} w_i x_i$$

Gradient hipotezy:

$$\nabla h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial h_{\mathbf{w}}}{\partial w_0}, \frac{\partial h_{\mathbf{w}}}{\partial w_1}, \ldots, \frac{\partial h_{\mathbf{w}}}{\partial w_n}\right] = [1, x_1, x_2, \ldots, x_n] = \mathbf{x}$$

Reguła delta (zwana reguła Widrowa-Hoffa, adaline lub LMS) dla hipotezy liniowej:

tryb epokowy

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta \sum_{\mathbf{x} \in P} (y - \mathbf{w}^T\mathbf{x})\mathbf{x}$$

lub tryb inkrementacyjny

$$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta (y - \mathbf{w}^T\mathbf{x})\mathbf{x}$$

UCZENIE PERCEPTRONU

Tryb epokowy	Tryb inkrementacyjny
1. Wybierz losowo **w**, ustal η	1. Wybierz losowo **w**, ustal η
2. Powtarzaj	2. Powtarzaj
2.1. $\Delta = 0$, $E = 0$	2.1. $E = 0$
2.2. Powtarzaj dla i =1, 2, ..., N	2.2. Powtarzaj dla i =1, 2, ..., N
$\Delta = \Delta + (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)\mathbf{x}_i$	$E = E + (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2$
$E = E + (y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)^2$	$\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta(y_i - \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i)\mathbf{x}_i$
2.3. $\mathbf{w} \leftarrow \mathbf{w} + \eta\Delta$	2.3. Jeśli osiągnięto warunek stopu, to zakończ
2.4. Jeśli osiągnięto warunek stopu, to zakończ	

Warunek stopu: osiągnięto k_{max} iteracji lub przez ostatnie K iteracji nie osiągnięto znaczącej poprawy rezultatu lub $E < E_{max}$.

W regresji wagi wyznacza się w sposób analityczny.

Błąd aproksymacji możemy zapisać:

$$E(h_{\mathbf{w}}) = \sum_{\mathbf{x} \in P} (y - h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}))^2 = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w}) = \mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - 2(\mathbf{X}\mathbf{w})^T\mathbf{Y} + (\mathbf{X}\mathbf{w})^T\mathbf{X}\mathbf{w}$$

gdzie:

$\mathbf{Y} = [y_1, y_2, ..., y_N]^T$ – wektor pożądanych odpowiedzi, $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{1,1} & \dots & x_{1,n} \\ 1 & x_{2,1} & \dots & x_{2,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{N,1} & \dots & x_{N,n} \end{bmatrix}$ – macierz przykładów

Przyrównując pochodną błędu do zera $-\mathbf{X}^T\mathbf{Y} + \mathbf{X}^T\mathbf{X}\mathbf{w} = 0$ otrzymujemy wagi modelu regresji liniowej:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$$

Uwaga: Jeśli kolumny **X** są liniowo zależne, to wyznacznik macierzy $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ jest zerowy i macierzy tej nie można odwrócić.

Dla przypadku jednowymiarowego (n = 1) otrzymujemy:

$$w_1 = \frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{N}(y_i - \bar{y})}, \quad w_0 = \bar{y} - w_1\bar{x}$$

gdzie i oznacza numer przykładu uczącego, $\bar{x}$ i $\bar{y}$ to wartości średnie w zbiorze uczącym.

REGRESJA KROKOWA

Problem: duża liczba atrybutów (zależnych od siebie, nie wpływających na zmienną wyjściową *y*)
Cel: wybrać niewielki podzbiór atrybutów, który pozwoli uprościć model zachowując jego dokładność.

Regresja krokowa (*stepwise regression*) pozwala wyłonić w procedurze krokowej atrybuty istotne i zbudować na nich model liniowy, który zapewnia najmniejszy błąd regresji.

Konstrukcja modelu regresji krokowej może przebiegać w trzech trybach:

- Krokowe dodawanie atrybutów –
  1. Ustal $\Phi = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ – zbiór atrybutów kandydujących i $\Omega = \varnothing$ – zbiór atrybutów istotnych
  2. Powtarzaj dla każdego $x_i \in \Phi$:
     2.1. Zbuduj model z wykorzystaniem wszystkich atrybutów z Ω i *i*-tego atrybutu z Φ; odnotuj błąd tego modelu
  3. Jeśli nie nastąpiła poprawa modelu w p. 2 – zakończ
  4. Wybierz atrybut z Φ, dla którego nastąpiła największa poprawa modelu i przenieś go z Φ do Ω

5. Powtórz kroki 2-5

- Krokowa eliminacja atrybutów –
  1. Ustal $\Omega = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ – zbiór atrybutów istotnych
  2. Powtarzaj dla każdego $x_i \in \Omega$:
     2.1. Zbuduj model z wykorzystaniem atrybutów z Ω pomijając *i*-ty atrybut; odnotuj błąd tego modelu
  3. Jeśli nie nastąpiła poprawa modelu w p. 2 – zakończ
  4. Wybierz atrybut z Ω, po pominięciu którego nastąpiła największa poprawa modelu i usuń go z Ω
  5. Powtórz kroki 2-5

- Naprzemienne użycie dwu powyższych trybów

Miarą poprawy modelu jest tzw. *p*-wartość (liczbowe wyrażenie istotności statystycznej) testu statystycznego *F*-Snedecora* (stosuje się też inne kryteria).

* patrz: Jóźwiak J., Podgórski J.: Statystyka od podstaw. PWE 2001, str. 403

REGRESJA GRZBIETOWA

Problem: duże wagi w_i (co do modułu) sprawiają, że wyjście y jest wrażliwe na małe zmiany wejść x_i

Cel: zmniejszyć wagi (co do modułu)

W regresji grzbietowej (*ridge regression*) kryterium zawiera sumę kwadratów wag jako składnik kary[†]:

$$E(h_{\mathbf{w}}) = \sum_{\mathbf{x} \in P} (y - h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}))^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} w_i^2 = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\mathbf{w}) + \lambda \mathbf{w}^T \mathbf{w}$$

gdzie $\lambda \geq 0$ jest parametrem określającym stopień uwzględnienia kary w kryterium.

Dla $\lambda = 0$ otrzymujemy zwykły model regresji liniowej; dla $\lambda = \infty$ otrzymujemy zerowe wagi.

Aby wyrównać wpływ poszczególnych wag na wartość kary przed wykonaniem obliczeń należy sprowadzić wartości wszystkich atrybutów do tej samej skali (wariancja próbkowa wszystkich atrybutów powinna wynosić 1).

[†] Zapis w postaci macierzowej wymaga wcześniejszego wyeliminowania wyrazu wolnego w_0 i scentrowania atrybutów. Wtedy macierz **X** ma rozmiary $N \times n$, a **w** – $N \times 1$. Szczegóły w [Tib].

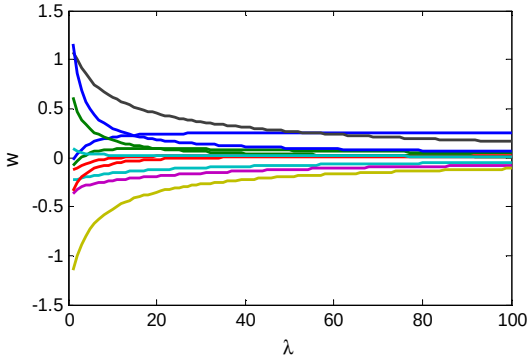
Wagi minimalizujące powyższe kryterium wyznacza się ze wzoru:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$$

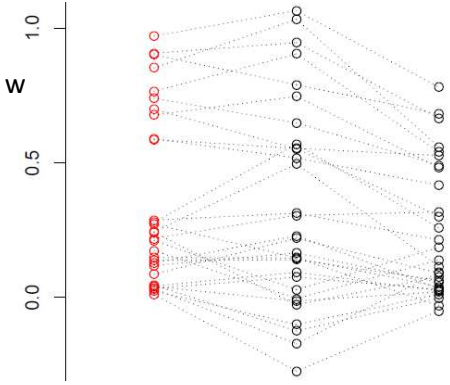
gdzie **I** jest macierzą jednostkową (z jedynkami na przekątnej) o wymiarach $n \times n$.

Optymalną wartość parametru λ dobiera się w procedurze kroswalidacji.

Rys. Przykładowe wartości wag dla różnych wartości λ.



Rys. Wartości wag (od lewej): rzeczywiste, estymowane w regresji liniowej, estymowane w regresji grzbietowej



REGULARYZACJA

Wzbogacenie kryterium o karę w postaci sumy kwadratów wag nazywa się regularyzacją Tichonowa. Regularyzacja zapobiega przeuczeniu modelu (nadmiernemu dopasowaniu).

Regularyzacja pozwala zredukować błąd średniokwadratowy (MSE). Odbywa się to poprzez redukcję wariancji, chociaż obciążenie modelu wzrasta.

Błąd MSE można zapisać jako:

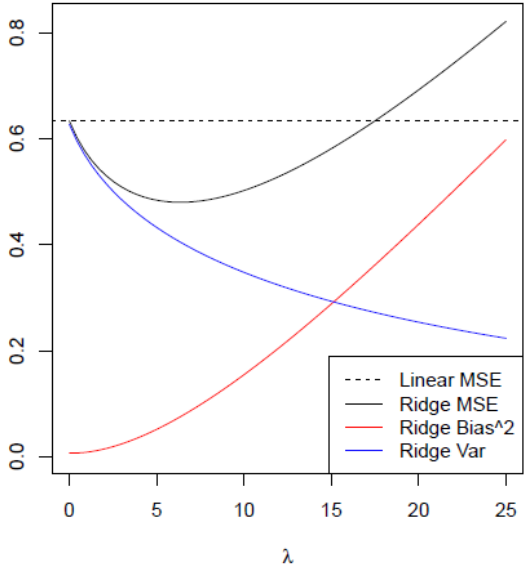
$$\underbrace{E[(f(\mathbf{x})-h(\mathbf{x}))^2]}_{\text{MSE}} = \underbrace{(E[h(\mathbf{x})]-f(\mathbf{x}))^2}_{\text{Kwadrat obciążenia}} + \underbrace{E[(h(\mathbf{x})-E[h(\mathbf{x})])^2]}_{\text{Wariancja}}$$

(mean squared error) $(\text{bias})^2$ (var)

gdzie E(.) oznacza wartość oczekiwaną.

Wariancja informuje jak wrażliwy jest model na drobne zmiany w zbiorze uczącym.

Obciążenie informuje jak dokładny jest model dla różnych zbiorów uczących.

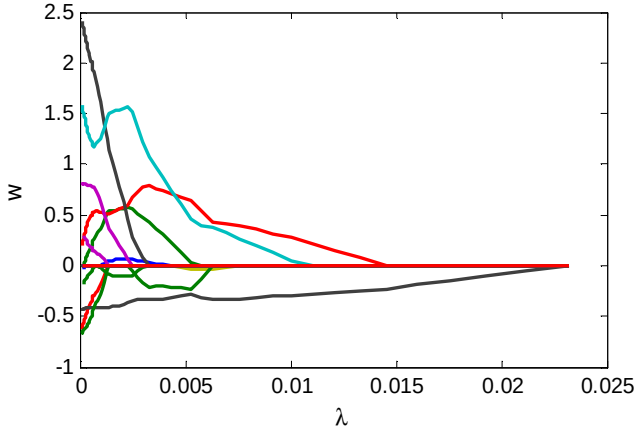


LASSO

LASSO (*Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) jest metodą regularyzacji modelu regresji liniowej, w której kryterium zawiera sumę modułów wag jako składnik kary:

$$E(h_{\mathbf{w}}) = \sum_{\mathbf{x} \in P} (y - h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}))^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} |w_i|$$

Wprowadzenie kary w postaci sumy modułów zamiast sumy kwadratów wag ma ciekawe konsekwencje. W regresji grzbietowej wagi zmniejszają się waz ze wzrostem λ, ale nigdy nie osiągają zera. W LASSO wagi mogą się zerować przy odpowiednio dużych wartościach λ. LASSO jest jednocześnie algorytmem regularyzacji i selekcji atrybutów (atrybuty z zerowymi wagami nie są uwzględniane w modelu).

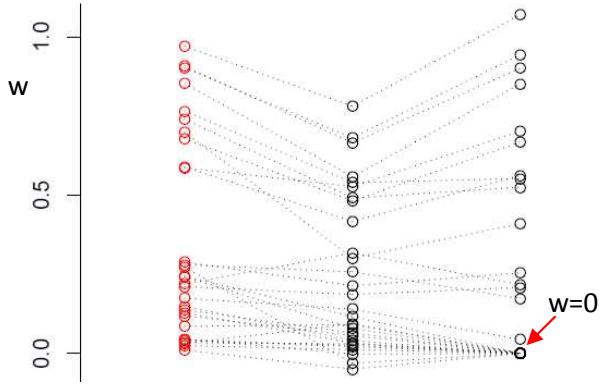


LASSO

Podobnie jak w regresji grzbietowej redukcja MSE odbywa się poprzez redukcję wariancji, chociaż obciążenie modelu wzrasta.

Wyznaczenie wartości wag minimalizujących kryterium używane w LASSO nie jest możliwe na drodze analitycznej jak w regresji grzbietowej lecz wymaga algorytmu iteracyjnego.

Rys. Wartości wag (od lewej): rzeczywiste, estymowane w regresji grzbietowej, estymowane w LASSO



Elastyczna sieć (*elastic net*) łączy regresję grzbietową z LASSO. Składnik kary ma tutaj postać:

$$\lambda \sum_{i=1}^{n} (\alpha |w_i| + (1-\alpha) w_i^2)$$

gdzie $\alpha \in [0, 1]$. Dla $\alpha = 0$ otrzymujemy regresję grzbietową, dla $\alpha = 1$ otrzymujemy LASSO.

ROZSZERZONA REPREZENTACJA

Rozszerzona reprezentacja polega na wzbogaceniu przykładów o dodatkowe atrybuty, które są funkcjami atrybutów oryginalnych, np: x_i^2, x_i^3, $x_i x_j$, $\log(x_i)$, $\sin(x_i)$, $1/x_i$ itd.

Model zbudowany na rozszerzonych przykładach, np. $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_1^2, x_2^2, x_1 x_2]$ postaci:

$$h_{\mathbf{w}}(\mathbf{x}) = w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_1^2 + w_4 x_2^2 + w_5 x_1 x_2 + w_0$$

to nadal model regresji liniowej, choć zależność pomiędzy **x** a *y*, którą wyraża nie jest liniowa! Wagi takiego modelu estymujemy opisanymi powyżej metodami regresji i aproksymacji liniowej.