Разбор летучки

Лекция 10

Линейная регрессия

Екатерина Тузова

Регрессия

X– объекты в $\mathbb{R}^n$; Y — ответы в $\mathbb{R}$
$X^l = (x_i, y_i)_{i=1}^l$ – обучающая выборка
$y_i = y(x_i), \qquad y : X \to Y$ – неизвестная зависимость

Регрессия

X– объекты в $\mathbb{R}^n$; Y — ответы в $\mathbb{R}$
$X^l = (x_i, y_i)_{i=1}^l$ – обучающая выборка
$y_i = y(x_i), \qquad y : X \to Y$ – неизвестная зависимость

$a(x) = f(x, w)$ – модель зависимости,
$w \in \mathbb{R}^p$ – вектор параметров модели.

Многомерная линейная регрессия

$x^1, \dots, x^n$ – числовые признаки
Модель многомерной линейной регрессии:

$$f(x, w) = \sum_{j=1}^{n} w_j x^j, \qquad w \in \mathbb{R}$$

Многомерная линейная регрессия

$x^1, \dots, x^n$ – числовые признаки
Модель многомерной линейной регрессии:

$$f(x, w) = \sum_{j=1}^{n} w_j x^j, \qquad w \in \mathbb{R}$$

Функционал квадрата ошибки:

$$Q(w, X^l) = \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i)^2 \to \min_w$$

Матричное представление

$$\underset{l\times n}{X} = \begin{pmatrix} x_1^1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots \\ x_l^1 & \dots & x_l^n \end{pmatrix} \qquad \underset{l\times 1}{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_l \end{pmatrix} \qquad \underset{n\times 1}{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \dots \\ w_n \end{pmatrix}$$

Матричное представление

$$\underset{l\times n}{X} = \begin{pmatrix} x_1^1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots \\ x_l^1 & \dots & x_l^n \end{pmatrix} \qquad \underset{l\times 1}{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \dots \\ y_l \end{pmatrix} \qquad \underset{n\times 1}{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \dots \\ w_n \end{pmatrix}$$

Функционал квадрата ошибки:

$$Q(w, X^l) = \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i)^2 = \|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

Нормальная система уравнений

Необходимое условие минимума:

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w} = 2X^T(Xw - y) = 0$$

Нормальная система уравнений

Необходимое условие минимума:

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w} = 2X^T(Xw - y) = 0$$

Откуда следует нормальная система задачи МНК:

$$X^T X w = X^T y$$

$X^T X$ – ковариационная матрица признаков $x^1, \ldots, x^n$

Нормальная система уравнений

Нормальная система задачи МНК:

$$X^T X w = X^T y$$

Нормальная система уравнений

Нормальная система задачи МНК:

$$X^T X w = X^T y$$

Решение системы:

$$w^* = (X^T X)^{-1} X^T y = X^+ y$$

X^+ – псевдообратная матрица

Нормальная система уравнений

Нормальная система задачи МНК:

$$X^T X w = X^T y$$

Решение системы:

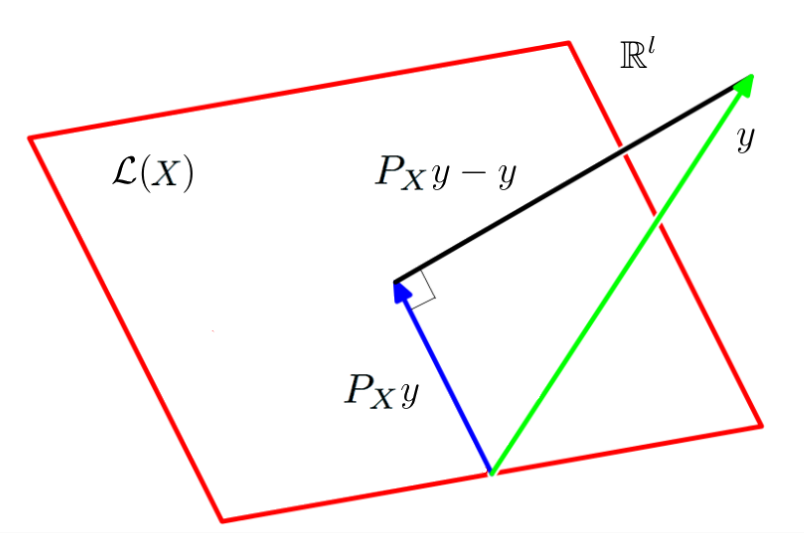
$$w^* = (X^T X)^{-1} X^T y = X^+ y$$

X^+ – псевдообратная матрица

Значение функционала: $Q(w^*) = \|P_X y - y\|^2$

где $P_X = X X^+ = X(X^T X)^{-1} X^T$ – проекционная матрица

Геометрический смысл



Сингулярное разложение (экономное)

Произвольная $l \times n$-матрица представима в виде сингулярного разложения:

$$X = VDU^T$$

Сингулярное разложение (экономное)

Произвольная $l \times n$-матрица представима в виде сингулярного разложения:

$$X = VDU^T$$

Основные свойства сингулярного разложения:

- $V_{l\times n} = (v_1, \dots, v_n)$ ортонормирована, $V^T V = I_n$,
  столбцы v_j - собственные векторы матрицы XX^T
- $U_{n\times n} = (u_1, \dots, u_n)$ ортогональна, $U^T U = I_n$,
  столбцы u_j - собственные векторы матрицы $X^T X$
- D диагональна, $D_{n\times n} = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \dots, \sqrt{\lambda_n})$,
  $\lambda_j > 0$ - собственные значения матриц $X^T X$ и XX^T

Решение МНК через сингулярное разложение

Псевдообратная X^+, вектор МНК-решения w^*, МНК-аппроксимация целевого вектора Xw^*

Решение МНК через сингулярное разложение

Псевдообратная X^+, вектор МНК-решения w^*, МНК-аппроксимация целевого вектора Xw^*

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

Решение МНК через сингулярное разложение

Псевдообратная X^+, вектор МНК-решения w^*, МНК-аппроксимация целевого вектора Xw^*

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

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

Решение МНК через сингулярное разложение

Псевдообратная X^+, вектор МНК-решения w^*, МНК-аппроксимация целевого вектора Xw^*

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

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

$$Xw^* = P_X y = (VDU^T)UD^{-1}V^Ty = VV^Ty = \sum_{j=1}^{n} v_j (v_j^T y)$$

Решение МНК через сингулярное разложение

Псевдообратная X^+, вектор МНК-решения w^*, МНК-аппроксимация целевого вектора Xw^*

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

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

$$Xw^* = P_X y = (VDU^T)UD^{-1}V^Ty = VV^Ty = \sum_{j=1}^{n} v_j (v_j^T y)$$

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

Проблема мультиколлинеарности

Если матрица $X^T X$ плохо обусловлена, то:

- решение становится неустойчивым и неинтерпретируемым, $\|w^*\|$ велико
- $E_{in} = \|Xw^* - y\|$ – мало
- $E_{out} = \|X'w^* - y'\|$ – велико

Проблема мультиколлинеарности

Если матрица $X^T X$ плохо обусловлена, то:

- решение становится неустойчивым и неинтерпретируемым, $\|w^*\|$ велико
- $E_{in} = \|Xw^* - y\|$ – мало
- $E_{out} = \|X'w^* - y'\|$ – велико

Вопрос: Как бороться с этой проблемой?

Проблема мультиколлинеарности

Стратегии устранения мультиколлинеарности и переобучения:

- Регуляризация: $\|w\| \to \min$
- Отбор признаков: $x^1, \ldots, x^n \to x^{j_1}, \ldots, x^{j_m}, \quad m << n$
- Преобразование признаков: $x^1, \ldots, x^n \to g^1, \ldots, g^m, \quad m << n$

Гребневая регрессия

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

$$Q_\tau(w) = \|Xw - y\|^2 + \tau\|w\|^2$$

где τ – неотрицательный параметр регуляризации.

Гребневая регрессия

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

$$Q_\tau(w) = \|Xw - y\|^2 + \tau\|w\|^2$$

где τ – неотрицательный параметр регуляризации.

Модифицированное МНК-решение (τI_n — «гребень»)

$$w^*_\tau = (X^T X + \tau I_n)^{-1} X^T y$$

Гребневая регрессия

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

$$Q_\tau(w) = \|Xw - y\|^2 + \tau\|w\|^2$$

где τ – неотрицательный параметр регуляризации.

Модифицированное МНК-решение (τI_n — «гребень»)

$$w_\tau^* = (X^T X + \tau I_n)^{-1} X^T y$$

Вопрос: Можно ли подбирать τ не вычисляя каждый раз обратную матрицу?

Преимущество сингулярного разложения

Модифицированное МНК-решение (τI_n — «гребень»)

$$w_\tau^* = (X^T X + \tau I_n)^{-1} X^T y$$

Преимущество сингулярного разложения

Модифицированное МНК-решение (τI_n — «гребень»)

$$w_\tau^* = (X^T X + \tau I_n)^{-1} X^T y$$

Преимущество сингулярного разложения:
Можно подбирать параметр τ , вычислив сингулярное разложение только один раз.

Сингулярное разложение

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

Сингулярное разложение

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

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

Сингулярное разложение

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

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

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

Сингулярное разложение

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

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

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

$X w_\tau^* \neq X w^*$ – зато решение становится более устойчивым

Выбор параметра регуляризации τ

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

$$Q(w^*_\tau, X^k) = \|X' w^*_\tau - y'\|^2 = \|X' U \operatorname{diag}\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau}\right) V^T y - y'\|^2$$

Выбор параметра регуляризации τ

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

$$Q(w^*_\tau, X^k) = \|X' w^*_\tau - y'\|^2 = \|X' U \operatorname{diag}\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_j + \tau}\right) V^T y - y'\|^2$$

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

Лассо Тибширани

$$\begin{cases} Q(w, X^l) = \|Xw - y\|^2 \to \min\limits_w \\ \sum_{j=1}^{n} |w_j| \leq \kappa \end{cases}$$

LASSO, Least Absolute Shrinkage and Selection Operator

Лассо Тибширани

$$\begin{cases} Q(w, X^l) = \|Xw - y\|^2 \to \min\limits_{w} \\ \sum_{j=1}^{n} |w_j| \leq \kappa \end{cases}$$

После замены переменных:

$$\begin{cases} w_j = w_j^+ - w_j^- \\ |w_j| = w_j^+ + w_j^-, \qquad w_j^+, w_j^- \geq 0 \end{cases}$$

ограничения принимают канонический вид:

$$\sum_{j=1}^{n} w_j^+ + w_j^- \leq \kappa$$

Лассо Тибширани

$$\begin{cases} Q(w, X^l) = \|Xw - y\|^2 \to \min\limits_w \\ \sum_{j=1}^n |w_j| \leq \kappa \end{cases}$$

После замены переменных:

$$\begin{cases} w_j = w_j^+ - w_j^- \\ |w_j| = w_j^+ + w_j^-, \qquad w_j^+, w_j^- \geq 0 \end{cases}$$

ограничения принимают канонический вид:

$$\sum_{j=1}^n w_j^+ + w_j^- \leq \kappa$$

Чем меньше κ, тем больше j таких, что $w_j^+ = w_j^- = 0$

Нелинейная регрессия

Нелинейная регрессия

Вопрос: Что изменится, если модель регрессии не линейна?

$$f(x, w), \qquad w \in \mathbb{R}^p$$

Метод Ньютона-Рафсена

Начальное приближение $w^{(0)} = (w_1^{(0)}, \ldots, w_p^{(0)})$
Итерационный процесс: $w^{(t+1)} = w^{(t)} - h_t(Q''(w^{(t)}))^{-1}Q'(w^{(t)})$

$Q'(w^{(t)})$ – градиент функционала Q в точке $w^{(t)}$
$Q''(w^{(t)})$ – гессиан функционала Q в точке $w^{(t)}$
h_t – величина шага

Метод Ньютона-Рафсена

$$Q(w, X^l) = \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i)^2 \to \min_w$$

Метод Ньютона-Рафсена

$$Q(w, X^l) = \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i)^2 \to \min_w$$

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} = 2 \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i) \frac{\partial (f(x_i, w))}{\partial w_j}$$

Метод Ньютона-Рафсена

$$Q(w, X^l) = \sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)^2 \to \min_w$$

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} = 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}$$

$$\frac{\partial^2 Q(w)}{\partial w_j \partial w_k} = 2\sum_{i=1}^{l}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_k} - 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial^2(f(x_i, w))}{\partial w_j \partial w_k}$$

Метод Ньютона-Рафсена

$$Q(w, X^l) = \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i)^2 \to \min_w$$

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} = 2 \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i) \frac{\partial (f(x_i, w))}{\partial w_j}$$

$$\frac{\partial^2 Q(w)}{\partial w_j \partial w_k} = 2 \sum_{i=1}^{l} \frac{\partial (f(x_i, w))}{\partial w_j} \frac{\partial (f(x_i, w))}{\partial w_k} - 2 \sum_{i=1}^{l} (f(x_i, w) - y_i) \frac{\partial^2 (f(x_i, w))}{\partial w_j \partial w_k}$$

Вопрос: Какая часть самая тяжелая?

Метод Ньютона-Рафсена

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} = 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}$$

Метод Ньютона-Рафсена

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} = 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}$$

$$\frac{\partial^2 Q(w)}{\partial w_j \partial w_k} = 2\sum_{i=1}^{l}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_k} - 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial^2(f(x_i, w))}{\partial w_j \partial w_k}$$

Метод Ньютона-Рафсена

$$\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j} = 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}$$

$$\frac{\partial^2 Q(w)}{\partial w_j \partial w_k} = 2\sum_{i=1}^{l}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_k} - 2\sum_{i=1}^{l}(f(x_i, w) - y_i)\frac{\partial^2(f(x_i, w))}{\partial w_j \partial w_k}$$

Линеаризация $f(x_i, w)$ в окрестности текущего $w^{(t)}$:

$$f(x_i, w) = f(x_i, w^{(t)}) + \sum_{j=1}^{p}\frac{\partial(f(x_i, w))}{\partial w_j}(w_j - w_j^{(t)}) + o(w_j - w_j^{(t)})$$

$\Rightarrow$ второе слагаемое в гессиане обнулилось

Матричные обозначения

$X_t = \left(\frac{\partial (f(x_i, w^{(t)}))}{\partial w_j^{(t)}} \right)_{l \times p}$ – матрица первых производных

$f_t = \left(f(x_i, w^{(t)}) \right)_{l \times 1}$ – вектор значений f

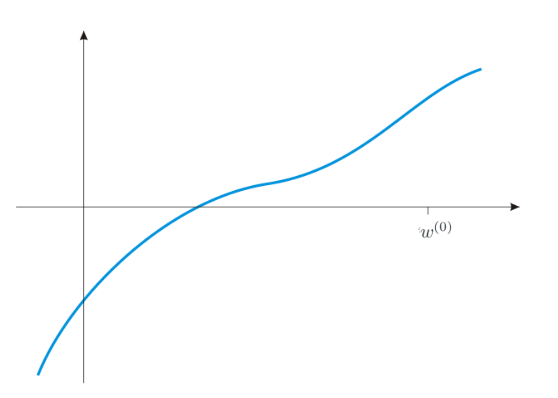
Формула t-й итерации метода Ньютона–Гаусса:

$$w^{(t+1)} = w^{(t)} - h_t \underbrace{\left(X_t^T X_t \right)^{-1} X_t^T (f_t - y)}_{\beta}$$

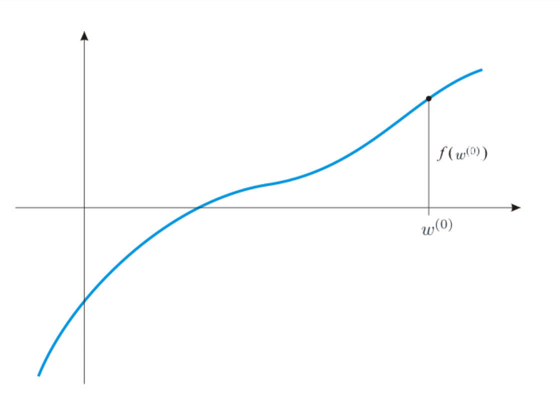
где β – решение многомерной линейной регрессии

$$\| X_t \beta - (f_t - y) \|^2 \to \min_{\beta}$$

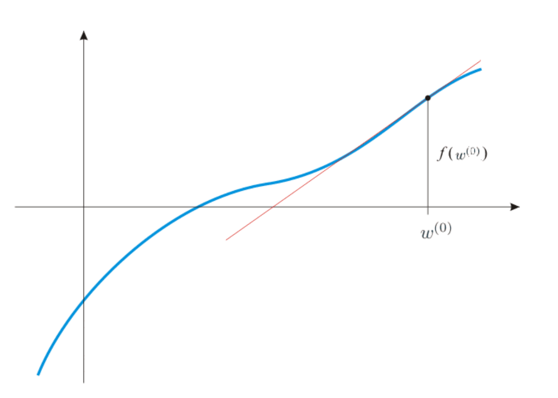
Метод Ньютона-Рафсена



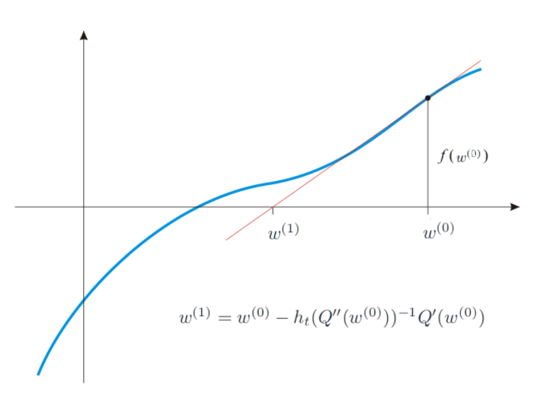
Метод Ньютона-Рафсена



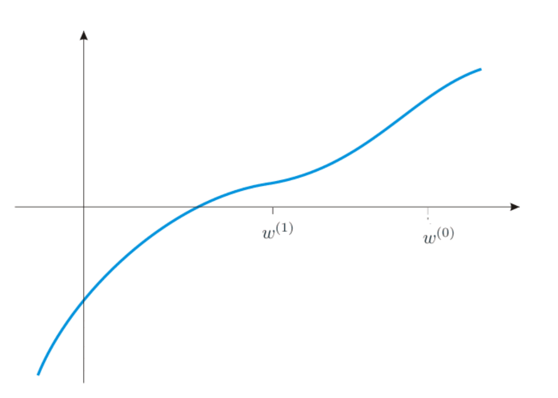
Метод Ньютона-Рафсена



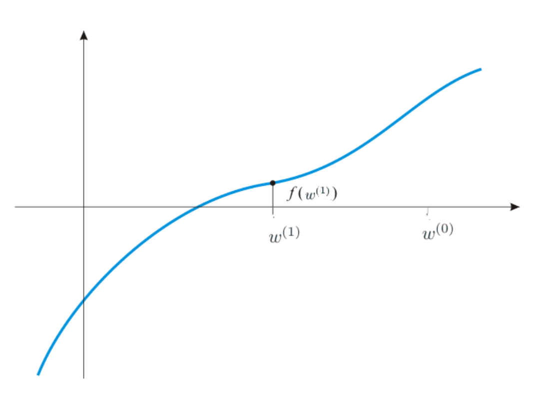
Метод Ньютона-Рафсена



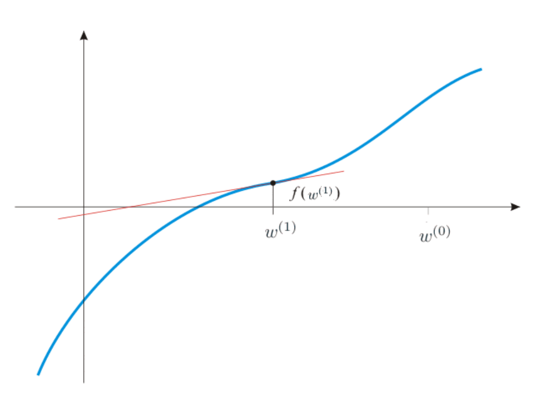
Метод Ньютона-Рафсена



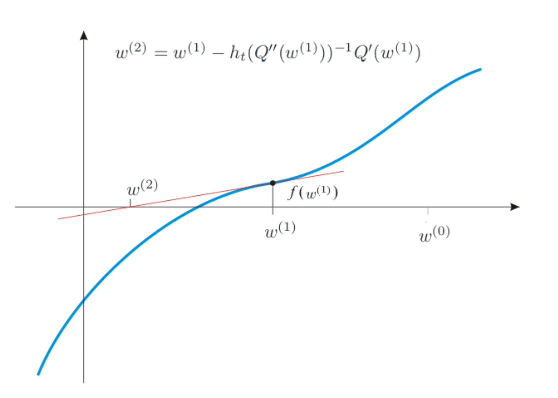
Метод Ньютона-Рафсена



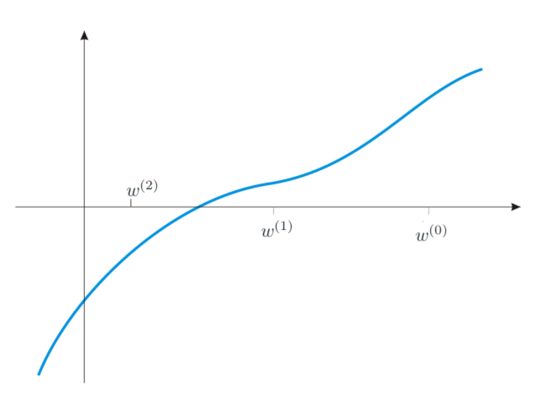
Метод Ньютона-Рафсена



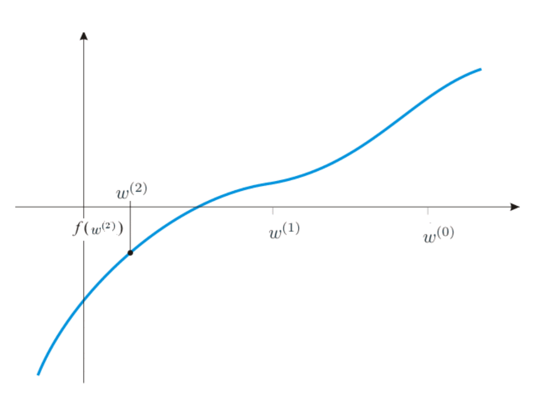
Метод Ньютона-Рафсена



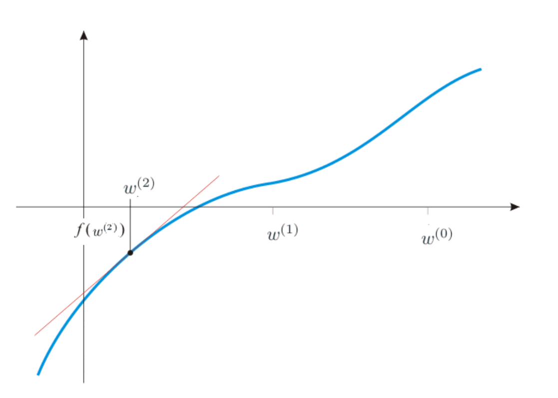
Метод Ньютона-Рафсена



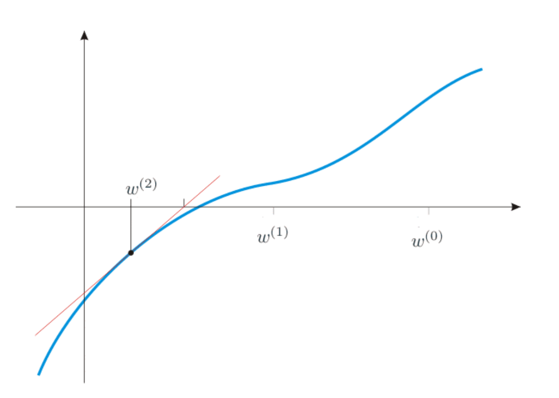
Метод Ньютона-Рафсена



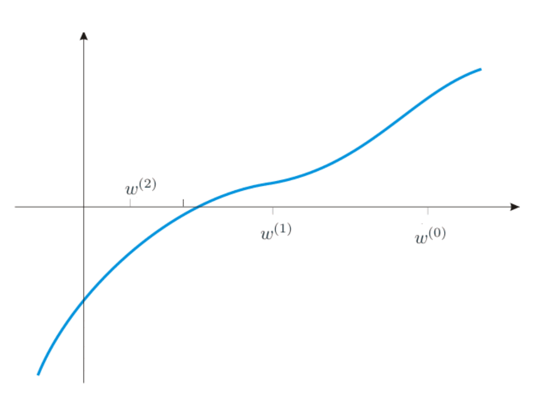
Метод Ньютона-Рафсена



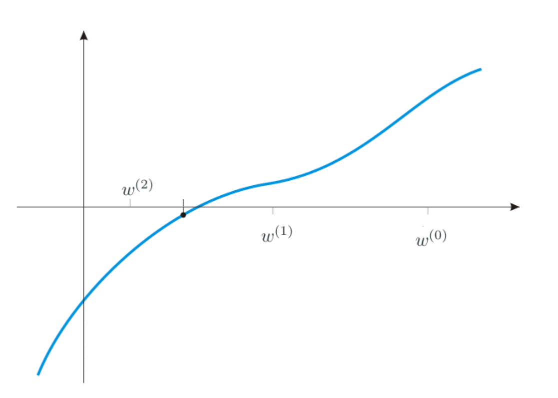
Метод Ньютона-Рафсена



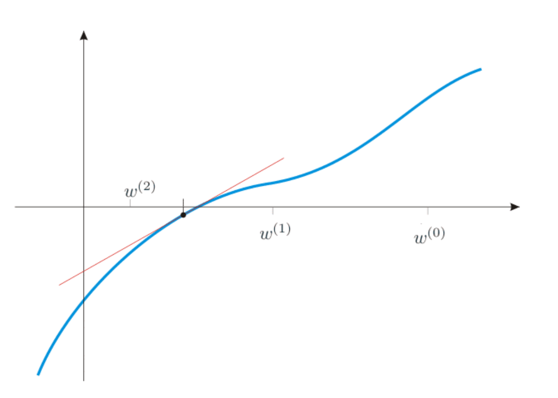
Метод Ньютона-Рафсена



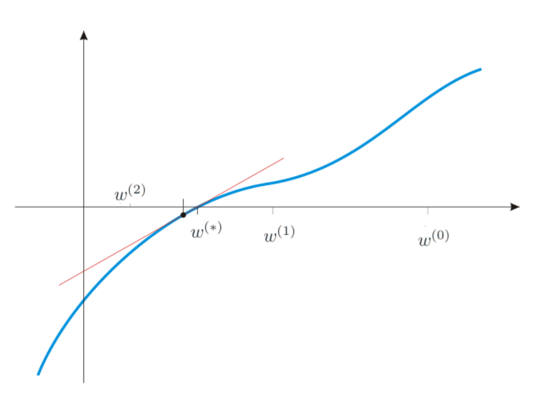
Метод Ньютона-Рафсена



Метод Ньютона-Рафсена



Метод Ньютона-Рафсена



Метод главных компонент

Метод главных компонент

$x^1, \ldots, x^n$ – исходные числовые признаки
$g^1(x), \ldots, g^m(x)$ – новые числовые признаки, $m < n$

Вопрос: Как сформулировать требование к новым признакам?

Метод главных компонент

$x^1, \dots, x^n$ – исходные числовые признаки

$g_1(x), \dots, g_m(x)$ – новые числовые признаки, $m < n$

Метод главных компонент

$x^1, \dots, x^n$ – исходные числовые признаки
$g_1(x), \dots, g_m(x)$ – новые числовые признаки, $m < n$

Требование: старые признаки должны линейно восстанавливаться по новым:

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

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

$$\sum_{i=1}^{l} \sum_{j=1}^{n} (\hat{x}_i^j - x_i^j)^2 \to \min_{g_s(x_i), u_{js}}$$

Матричные обозначения

$$\underset{l\times n}{X} = \begin{pmatrix} x_1^1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots \\ x_l^1 & \dots & x_l^n \end{pmatrix} \qquad \underset{l\times m}{G} = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & \dots & g_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ g_1(x_l) & \dots & g_m(x_l) \end{pmatrix}$$

$$\underset{n\times m}{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{1m} \\ \dots & \dots & \dots \\ u_{n1} & \dots & u_{nm} \end{pmatrix}$$

U – линейное преобразование новых признаков в старые

$$\hat{X} = GU^T \approx X$$

Матричные обозначения

$$\underset{l\times n}{X} = \begin{pmatrix} x_1^1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots \\ x_l^1 & \dots & x_l^n \end{pmatrix} \qquad \underset{l\times m}{G} = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & \dots & g_m(x_1) \\ \dots & \dots & \dots \\ g_1(x_l) & \dots & g_m(x_l) \end{pmatrix}$$

$$\underset{n\times m}{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & u_{1m} \\ \dots & \dots & \dots \\ u_{n1} & \dots & u_{nm} \end{pmatrix}$$

U – линейное преобразование новых признаков в старые

$$\hat{X} = GU^T \approx X$$

Найти: новые признаки G и преобразование U:

$$\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=1}^{n}(\hat{x}_i^j - x_i^j)^2 = \|GU^T - X\|^2 \to \min_{G,U}$$

Основная теорема

Если $m < \operatorname{rank} X$, то минимум $\|GU^T - X\|^2$ достигается, когда столбцы U - это с.в. матрицы $X^T X$, соответствующие m максимальным с.з. $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$, а матрица $G = XU$.

Основная теорема

Если $m < \operatorname{rank} X$, то минимум $\|GU^T - X\|^2$ достигается, когда столбцы U - это с.в. матрицы $X^T X$, соответствующие m максимальным с.з. $\lambda_1, \dots, \lambda_m$, а матрица $G = XU$.

При этом:

- матрица U ортонормирована: $U^T U = I_m$
- $G^T G = \Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$
- $\|GU^T - X\|^2 = \|X\|^2 - tr\Lambda = \sum\limits_{j=m+1}^{n} \lambda_j$

Связь с сингулярным разложением

Если взять $m = n$, то:

- $\|GU^T - X\|^2 = 0$

Связь с сингулярным разложением

Если взять $m = n$, то:

- $\|GU^T - X\|^2 = 0$
- представление $\hat{X} = GU^T = X$ точное и совпадает с сингулярным разложением при $G = V\sqrt{\Lambda}$

$$X = GU^T = V\sqrt{\Lambda}U^T, \;\; U^TU = I_m, \;\; V^TV = I_m$$

Связь с сингулярным разложением

Если взять $m = n$, то:

- $\|GU^T - X\|^2 = 0$
- представление $\hat{X} = GU^T = X$ точное и совпадает с сингулярным разложением при $G = V\sqrt{\Lambda}$

$$X = GU^T = V\sqrt{\Lambda}U^T, \;\; U^TU = I_m, \;\; V^TV = I_m$$

- линейное преобразование U работает в обе стороны:

$$X = GU^T, \quad G = XU$$

Эффективная размерность выборки

Упорядочим с.з. $X^T X$ по убыванию: $\lambda_1 > \dots > \lambda_n > 0$
Эффективная размерность выборки – это наименьшее целое m, при котором

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

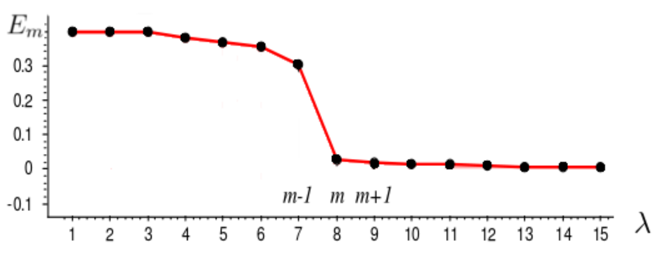
Эффективная размерность выборки

Упорядочим с.з. X^TX по убыванию: $\lambda_1 > \dots > \lambda_n > 0$

Эффективная размерность выборки – это наименьшее целое m, при котором

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

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



Решение задачи НК в новых признаках

Заменим X на её приближение GU^T:

$$\|GU^Tw - y\|^2 = \|G\hat{w} - y\|^2 \to \min_{\hat{w}}$$

Связь нового и старого вектора коэффициентов:

$$w = U\hat{w}, \qquad \hat{w} = U^Tw$$

Решение задачи НК в новых признаках

Заменим X на её приближение GU^T:

$$\|GU^T w - y\|^2 = \|G\hat{w} - y\|^2 \to \min_{\hat{w}}$$

Связь нового и старого вектора коэффициентов:

$$w = U\hat{w}, \qquad \hat{w} = U^T w$$

Решение задачи наименьших квадратов относительно $\hat{w}$ (единственное отличие – m слагаемых вместо n):

$$\hat{w}^* = D^{-1} V^T y = \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} u_j (v_j^T y)$$

$$G\hat{w}^* = VV^T y = \sum_{j=1}^{m} v_j (v_j^T y)$$

Вопросы?

Что почитать по этой лекции

- T. Hastie, R. Tibshirani "The Elements of Statistical Learning" Chapter 3

На следующей лекции

- Bias-variance tradeoff
- Кривые обучения