4. Regresija II

Strojno učenje 1, UNIZG FER, ak. god. 2021./2022.

Jan Šnajder, predavanja, v1.9

Prošli smo puta pričali o **linearnoj regresiji**: definirali smo linearan model, funkciju kvadratne pogreške i optimizaciju, koja se svela na izračun pseudoinverza matrice dizajna. Pogledali smo i koja je probabilistička interpretacija regresije i zaključili smo da – ako pretpostavimo da je **šum** u oznakama normalno distribuiran – onda je upravo **kvadratna pogreška** ona koja maksimizira vjerojatnost skupa označenih podataka. To nam je dalo probabilističko opravdanje za uporabu kvadratne pogreške i uspostavilo (našu prvu) vezu prema probabilističkom strojnom učenju.

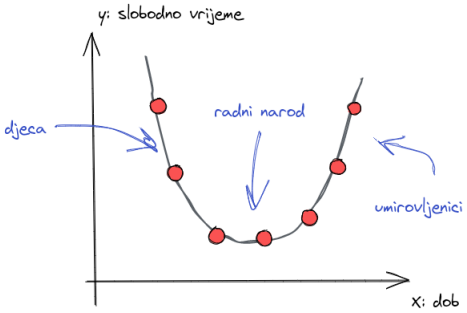
U ovom predavanju nastavljamo razmatrati regresiju. Konkretno, pričat ćemo o **preslikavanju u prostor značajki** i o **regularizaciji**. Ispostavit će se da su to dva vrlo važna koncepta u strojnom učenju, koja se koriste u mnogim algoritmima strojnog učenja, a ne samo kod regresije. 1

1 Nelinearna regresija

Za početak, prisjetimo se modela **linearne regresije**. Model je definiran kao linearna kombinacija značajki. Drugim riječima: zavisna varijabla je **linearna funkcija** nezavisnih varijabli:

$$h(\mathbf{x};\mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$$

Međutim, često će u praksi veza između nezavisnih varijabli i zavisne varijable biti **nelinearna**. Na primjer, slobodno vrijeme (kao zavisna varijable) na temelju dobi (kao nezavisne varijable).



▸ **PRIMJER**

Još nekoliko primjera za koje nam treba nelinearna regresija:

- (1) Cijena automobila s obzirom na kilometražu – naglo opada pa onda stagnira (ovo smo prošli put uzeli kao primjer linearne ovisnosti, ali u stvarnosti to vjerojatno nije slučaj)
- (2) Box Office Revenue s obzirom na cijenu produkcije – raste pa stagnira
- (3) Prosjek ocjena s obzirom na broj sati provedenih na predavanjima – konkavna (osim za predmet strojno učenje!)

1.1 Model nelinearne regresije

Da bismo modelirali nelinearne ovisnosti, treba nam **nelinearan model**. Npr., recimo da radimo jednostavnu regresiju ($n = 1$). Umjesto linearnog modela

$$h(x; w_0, w_1) = w_0 + w_1 x \quad \in \mathcal{H}_1$$

možemo model definirati kao polinom drugog stupnja:

$$h(x; w_0, w_1, w_2) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 \quad \in \mathcal{H}_2$$

Takvim modelom mogli bismo vrlo točno modelirati ove ranije primjere. Primijetite da je model $\mathcal{H}_2$ **složeniji** (odnosno većeg kapaciteta) od modela $\mathcal{H}_1$: model $\mathcal{H}_2$ sadrži nelinearne hipoteze, a uključuje i sve linearne hipoteze koje sadrži model $\mathcal{H}_1$. Konkretno, za $w_2 = 0$, isključujemo kvadratnu značajku, pa polinomijalni model degenerira na linearni. Dakle: $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}_2$. Primijetimo također da ta povećana složenost dolazi s cijenom: model $\mathcal{H}_2$ ima jedan parametar više od modela $\mathcal{H}_1$ (parametar w_2).

Pogledajmo drugi primjer. Radimo višestruku regresiju s $n = 2$. Na primjer, predviđanje cijene nekretnine na temelju površine (x_1) i starosti (x_2). Linearan model je:

$$h(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2$$

Nelinearan model mogao bi opet biti polinom drugog stupnja:

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

Ovdje, osim kvadratnih značajki, imamo još nešto zanimljivo: značajka $x_1 x_2$ zove se **interakcijska značajka** (ili **cross-term**), i ona modelira interakciju između dviju ulaznih varijabli. Npr., ako je nekretnina velike površine i vrlo stara, onda će ova značajka imati visoku vrijednost (to, na primjer, može indicirati veliku staru vilu... možda je to poželjna nekretnina s visokom cijenom?).

Korištenje polinoma drugog stupnja samo je jedan način – ne i jedini – kako dobiti nelinearan model. Veću nelinearnost mogli smo ostvariti da smo model definirali polinomom stupnja višeg od dva. Dodavanje interakcijskih značajki drugi je način da se model učini nelinearnim. Možemo, naravno, i kombinirati ova dva načina. Nadalje, nelinearnost se može ostvariti i drugim funkcijama koje nisu polinomi (premda mi u to nećemo ulaziti). 2

Evo nekoliko različitih regresijskih modela, temeljenih na polinomima, koji se razlikuju po načinu modeliranja nelinearnosti:

- Linearna višestruka regresija:

  $$h(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n$$

  Ovaj model ima više značajki (ukupno n), ali je posve linearan, dakle, ne modelira nikakvu nelinearnost.

- Jednostruka (jednostavna) polinomijalna regresija ($n = 1$):

  $$h(x; \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \cdots + w_d x^d$$

  Ovaj model ima samo jednu značajku ($n = 1$), no koristi polinom stupnja d kako bi modelirao nelinearnost. Primijetite da je d ovdje **hiperparametar**, budući da određuje složenost modela.

- Višestruka polinomijalna regresija ($n = 2, d = 2$):

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

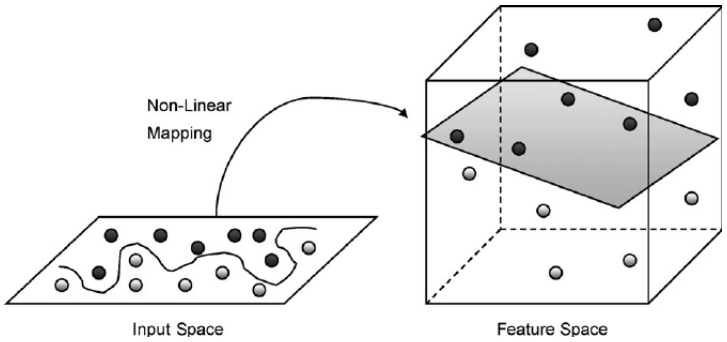
  Ovaj model ima dvije značajke ($n = 2$) i koristi polinom drugog stupnja $d = 2$ kako bi modelirao nelinearnost. Osim kvadratnih značajki x_1^2 i x_2^2, model sadrži i interakcijsku značajku $x_1 x_2$, kojom može modelirati interakciju između značajki x_1 i x_2 (odnosno neaditivni efekt ulaznih varijabli na izlaznu varijablu).

Ovo je samo nekoliko primjera; očito, možemo definirati model proizvojnog stupnja polinoma, možemo uključiti ili ne uključiti interakcijske članove za samo neke parove varijabli, možemo uključiti interakcijske članove za više od jednog para varijabli, itd. (I opet napomenimo da se nelinearnost može ostvariti i nekim drugim nelinearnim funkcijama, ne nužno polinomijalnima.)

1.2 Preslikavanje u prostor značajki

Premda su ovi modeli zapravo različiti, mi bismo ih voljeli nekako **unificirati**, da ih možemo tretirati na isti način kada radimo optimizaciju. To nas dovodi do jedne poprilično moćne ideje u strojnom učenju: uvijek kada želimo s linearnog modela preći na nelinearni, umjesto da mijenjamo model, mi ćemo promijeniti podatke! Način na koji ćemo promijeniti podatke jest da ih preslikamo iz **ulaznog prostora** (engl. *input space*) u neki drugi prostor. Taj drugi prostor zvat ćemo **prostor značajki** (engl. *feature space*). Postupak preslikavanja zvat ćemo **preslikavanje u prostor značajki** (engl. *feature mapping*). Ako odaberemo prikladno preslikavanje, onda će podatci – premda u ulaznom prostoru nisu bili linearni – u prostoru značajki to biti! 3

Ovakvo preslikavanje je sveprisutno u strojnom učenju, kako u regresiji, tako i u klasifikaciji. Npr., kod klasifikacije:



Prikladnim (nelinearnim) preslikavanjem iz ulaznog prostora u prostor značajki više dimenzije možemo ostvariti da primjeri, koji u ulaznome prostoru nisu bili linearno odvojivi, to budu u prostoru značajki. Na ovom primjeru vidimo da linearna granica (hiperravnina) u prostoru značajki, koja savršeno odjeljuje primjere dviju klasa, u ulaznome prostoru odgovara nelinearnoj granici između tih primjera. No, umjesto da pokušamo u ulaznom prostoru naći nelinearnu hipotezu, mi ćemo primjere nelinearnim preslikavanjem preslikati u prostor značajki veće dimenzije i tamo ih onda odvojiti linearnom hipotezom. U ulaznom prostoru činit će se kao da smo ih odvojili nelinearnom hipotezom.

Ideja će pritom biti uvijek ista: problem koji je ulaznom prostoru nelinearan, nelinearnim preslikavanjem preslikat ćemo u prostor više dimenzije gdje će on biti linearan, i onda ćemo tamo primijeniti linearne modele.

Definirajmo sada formalno kako se radi ovo preslikavanje. Uvest ćemo fiksan skup tzv. **baznih funkcija** (nelinearne funkcije ulaznih varijabli):

$$\{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_m\}$$

gdje $\phi_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Dakle, svaka bazna funkcija ϕ_j uzima cijeli vektor primjera $\mathbf{x}$ i preslikava ga u jedan broj. Taj broj odgovara jednoj od m značajki u m-dimenzijskome prostoru značajki. Baznih funkcija ukupno ima $m + 1$, po jedna za svaku dimenziju m-dimenzijskog prostora značajki, plus jedna dodatna bazna funkcija, ϕ_0, koja je dogovorno definirana kao $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$ i ona odgovara "dummy" jedinici kakvu smo imali i kod proširenog vektora $\mathbf{x}$. **Funkcija preslikavanja** definirana je onda kao vektor dobiven primjenom pojedinačnih baznih funkcija na primjer $\mathbf{x}$:

$$\boldsymbol{\phi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{m+1}$$
$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = \big(\phi_0(\mathbf{x}), \phi_1(\mathbf{x}), \phi_2(\mathbf{x}), \ldots, \phi_m(\mathbf{x})\big)$$

Funkcija preslikavanja značajki preslikava primjere iz n-dimenzijskog ulaznog prostora u m-dimenzijski prostor značajki. Tipično je $m > n$, odnosno preslikavamo u prostor više dimenzije od ulaznog prostora. Zašto? Zato jer imamo veću šansu da će nešto što je u ulaznom prostoru bilo nelinearno u prostoru više dimenzije postati linearno. 4

Sada to preslikavanje možemo lako ugraditi u naš linearan model, jednostavno tako da vektor $\mathbf{x}$ zamijenimo vektorom $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$:

$$h(\mathbf{x}; \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{m} w_j \phi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

gdje je, prisjetimo se, vektor $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$ proširen "dummy" značajkom, tj. $\phi_0(\mathbf{x}) = 1$.

Ovime smo ostvarili naš cilj: primjeri iz ulaznog prostora preslikavaju se u neki prikladni prostor značajki, ali je sâm model ostao nepromijenjen – i dalje je to linearan model, jedina je razlika što umjesto značajki x_j koristimo preslikane značajke $\phi_j(\mathbf{x})$.

Ovakav model naziva se **linearan model regresije**. To je model koji je **linearan u parametrima** (w_j), ali koji – ovisno o funkciji preslikavanja – ne mora biti linearan u izvornim značajkama!

Ovdje treba paziti na suptilne razlike u nazivlju: **linearan model regresije** nije isto što i **linearna regresija**. Linearna regresija (koju smo radili prošli puta) poseban je slučaj linearnog modela regresije kod kojega ne radimo baš nikakvo preslikavanje. 5

Sada kada smo općenito definirali funkciju preslikavanja, pogledajmo i neke konkretne funkcije preslikavanja. Uz odgovarajući odabir funkcije preslikavanja, lako možemo dobiti bilo koji od ranije razmatranih linearnih modela regresije.

- Linearna višestruka regresija:

  $$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

  Ovdje zapravo nemamo nikakvog preslikavanja, tj. funkcija preslikavanja je zapravo funkcija identiteta (uz proširenje "dummy" jedinicom), $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (1, \mathbf{x})$. S takvom funkcijom preslikavanja naš linearan model regresije je model linearne regresije (zgodna igra riječi!).

- Jednostruka (jednostavna) polinomijalna regresija ($n = 1$):

  $$\boldsymbol{\phi}(x) = (1, x, x^2, \ldots, x^d)$$

  Značajku x preslikavamo u polinom stupnja d, čime iz 1-dimenzijskog ulaznog prostora ($n = 1$) prelazimo u d-dimenzijski prostor značajki ($m = d$).

- Višestruka polinomijalna regresija drugog stupnja ($n = 2, d = 2$):

  $$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, x_1 x_2, x_1^2, x_2^2)$$

  Ovdje iz dvodimenzijskog ulaznog prostora preslikavamo u 5-dimenzijski prostor značajki primjenom funkcije preslikavanja definirane kao polinom drugog stupnja s interakcijskom značajkom. Prostor značajki sastoji od izvornih značajki x_1 i x_2, te dodatno od interakcijske značajke $x_1 x_2$ i dviju kvadratnih značajki, x_1^2 i x_2^2. 6

1.3 Optimizacijski postupak

Ovime smo riješili pitanje modela. Funkcija gubitka, odnosno funkcija pogreške, ista je kao prije (jer je izlaz modela isti kao prije): dakle, to je kvadratni gubitak odnosno funkcija kvadratne pogreške. Ostaje nam još razmotriti **optimizacijski postupak**. Kako izgleda optimizacijski postupak za linearan model regresije?

Dobra vijest je što se baš ništa suštinski ne mijenja u odnosu na ono što smo već izveli! Naime, model s funkcijom preslikavanja je i dalje linearan model. Jedino što ćemo, umjesto

matrice dizajna $\mathbf{X}$, optimizaciju provesti nad matricom dizajna u kojoj smo proveli preslikavanje u prostor značajki. Tu matricu označit ćemo sa $\mathbf{\Phi}$.

Dakle, umjesto matrice dizajna (koja je definirana s izvornim značajkama):

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} \dots & x_n^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} \dots & x_n^{(2)} \\ \vdots & & & \\ 1 & x_1^{(N)} & x_2^{(N)} \dots & x_n^{(N)} \end{pmatrix}_{N \times (n+1)}$$

sada ćemo imati matricu dizajna u kojoj smo na svakom primjeru primijenili funkciju preslikavanja $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$:

$$\mathbf{\Phi} = \begin{pmatrix} 1 & \phi_1(\mathbf{x}^{(1)}) & \dots & \phi_m(\mathbf{x}^{(1)}) \\ 1 & \phi_1(\mathbf{x}^{(2)}) & \dots & \phi_m(\mathbf{x}^{(2)}) \\ \vdots & & & \\ 1 & \phi_1(\mathbf{x}^{(N)}) & \dots & \phi_m(\mathbf{x}^{(N)}) \end{pmatrix}_{N \times (m+1)} = \begin{pmatrix} \phi(\mathbf{x}^{(1)})^{\mathrm{T}} \\ \phi(\mathbf{x}^{(2)})^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \phi(\mathbf{x}^{(N)})^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}_{N \times (m+1)}$$

ovdje nemojmo zaboraviti na "dummy" jedinicu (prvi stupac u matrici $\mathbf{\Phi}$. Optimizacijskom postupku je, dakako, svejedno s kakvom matricom radi. Prije smo imali:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} = \mathbf{X}^{+}\mathbf{y}$$

a sada jednostavno podmećemo matricu $\mathbf{\Phi}$ umjesto $\mathbf{X}$:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} = \mathbf{\Phi}^{+}\mathbf{y}$$

gdje je $\mathbf{\Phi}^{+} = (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}$ pseudoinverz matrice dizajna $\mathbf{\Phi}$. Za pseudoinverz matrice $\mathbf{\Phi}$, vrijede, naravno, sve iste napomene kao i one koje smo prošli put dali za pseudoinverz matrice dizajna $\mathbf{X}$.

Ovime smo dobili ono što smo i željeli: jedan unificirani algoritam za regresiju, neovisno o tome koju funkciju preslikavanja $\boldsymbol{\phi}$ odaberemo. To je izvrsno! No pitanje je sada: koju funkciju preslikavanja odabrati? To nas vodi do iduće teme.

2 Prenaučenost

Prošli tjedan rekli smo da, ako na raspolaganju imamo familiju modela, onda trebamo odabrati optimalan model za naš problem. U suprotnom će model biti **prenaučen** ili **podnaučen**. Također smo rekli da su različiti modeli indeksirani **hiperparametrima** modela.

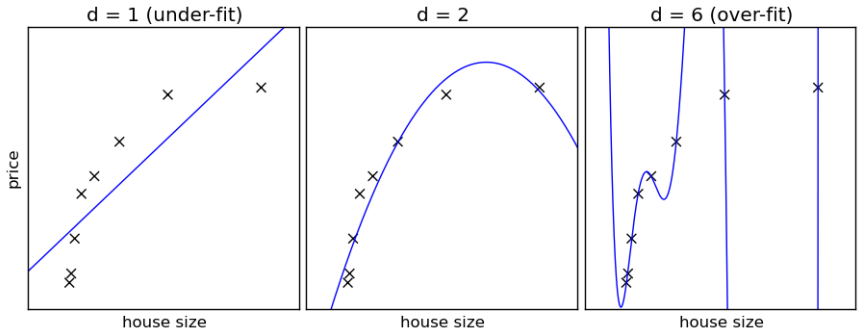
Kao što smo vidjeli, kod linearnog modela regresije možemo ostvarili različite složenosti modela odabirom odgovarajuće funkcije preslikavanja. Što je onda hiperparametar kod linearnog modela regresije? Pa, hiperparametar je upravo funkcija preslikavanja $\boldsymbol{\phi}$. Naime, ovisno o tome kakvu funkciju preslikavanja odabremo, model će biti više ili manje složen. Npr., model polinoma drugog stupnja je složeniji model od linearnog modela. Dalje, model polinom trećeg stupnja je još složeniji, itd. Istodobno trebamo biti svjesni da, što je model složeniji, to on ima više parametara, i takav je model onda lakše prenaučiti.

▸ **PRIMJER**

Recimo da želimo naučiti model linearne regresije za predviđanje cijena nekretnina u Bostonu. Jednostavnosti radi, razmotrimo jednostavnu (tj. jednoulaznu) regresiju, $n = 1$. Neka je nezavisna varijabla stambena površina nekretnine. Razmatramo tri modela: polinom prvog stupnja (iliti pravac), polinom drugog stupnja (parabola) i polinom šestog stupnja ("sekstičan polinom", u slučaju

da vas je zanimalo). Kao što već znamo, sve te modele lako možemo definirati prikladnom funkcijom preslikavanja $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (x_1, x_1^2, \ldots, x_1^d)$, gdje je d željeni stupanj polinoma.

Neka se naš skup označenih primjera sastoji od šest primjera, tj. $|\mathcal{D}| = 6$. Nakon što so naučili tri spomenuta modela, dobivamo u ulaznom prostoru ovakve krivulje:



Što se ovdje dogodilo? Polinom prvog stupnja ne čini se baš prikladnim modelom, budući da predikicije tog modela znatno odstupaju od ciljnih vrijednosti. Taj model je podnaučen. Polinom drugog stupnja čini se vrlo dobrim na našem skupu podataka. Za taj model bismo na našem skupu $\mathcal{D}$ rekli da je optimalne složenosti (premda nam zdrav razum govori da parabola vjerojatno nije najbolji način za modeliranje cijene stana u ovisnosti o površini; odnos je vjerojatno nelinearan, ali ne očekujemo baš da cijene za nekretnine velike površine padaju, već prije da stagniraju). Polinom šestog stupnja je apsolutni šampion u smislu da je regresijska krivulja doista prošla kroz svaku točku, međutim jasno je da je taj model prenaučen. Čini se razumnim pretpostaviti da cijena o površini nekretnine ovisi nekako nelinearno, no malo je vjerojatno da je ta ovisnost tako histerična kako ju modelira hipoteza definirana polinomom šestog stupnja. Ovaj se model naučio šumu u podatcima, pa je rezultat hipoteza koja žestoko oscilira i koja će očito loše generalizirati na neviđenim podatcima.

7

Kako spriječiti prenaučenost modela? Ovo je općenito pitanje, i odgovor vrijedi kako za algoritam regresije, tako i za većinu drugih algoritama strojnog učenja. Glavni načini za sprječavanje prenaučenosti su sljedeći:

- **Koristiti više primjera za učenje** – intuitivno, što imamo više primjera, to će regresijskoj krivulji biti teže da prođe baš kroz svaki od njih. Kada je primjera toliko da krivulja ne može proći kroz svaki od njih, kriterij minimizacije kvadratnog odstupanja će se pobrinuti da parametri budu takvi da krivulja minimizira prosječno kvadratno odstupanje, što znači da će krivulja manje oscilirati. Dakle, što više primjera imamo, to stabilnija hipoteza, odnosno to manje prenaučen model. Premda je ovaj recept za sprječavanje prenaučenosti jednostavan, u praksi je uglavnom teško izvediv: naime, u praksi je broj označenih primjera redovito ograničen, i ne možemo samo tako pribaviti nove primjere (ili ih nemamo, ili je njihovo označavanje skupo, ili je označavanje dugotrajno);
- **Odabrati model unakrsnom provjerom** – ovo nam je već poznato. Konkretno, kod modela linearne regresije, to bi značilo da na skupu za učenje treniramo modele s različitim funkcije preslikavanja, koje zatim ispitujemo na ispitnom skupu, te odabiremo onaj model koji ima najmanju pogrešku na ispitnom skupu, jer taj model najbolje generalizira na neviđene podatke. Ako je funkcija preslikavanja definirana kao polinom stupnja d, onda između takvih funkcija možemo uspostaviti potpuni uređaj po složenosti modela, gdje složenost određuje hiperparametar d. Unakrsna provjera svodi se onda na ispitivanje hiperparametra d iz nekog unaprijed zadanog intervala, npr., $d \in \{1, 2, \ldots, 6\}$;
- **Odabrati podskup značajki** – model je to složeniji što ima više značajki. Ako smanjimo broj značajki, dobit ćemo jednostavniji model. Naravno, ne bi bilo pametno ukloniti značajke koje su korisne; idealno, izbacili bismo iz modela one značajke koje su besko-

risne. Postupak pronalaženja optimalnog podskupa značajki naziva se **odabir značajki** (engl. *feature selection*), i o njemu ćemo pričati na samom kraju predmeta, te razmotriti niz algoritama za odabir značajki. Budući da skup značajki zapravo definira model, na postupak odabira značajki možemo gledati kao na odabir modela;

- **Reducirati dimenzionalnost ulaznog prostora** – umjesto izbacivanja nepotrebnih značajki, možemo cijeli ulazi prostor preslikati u prostor značajki nižih dimenzija. Te nove značajke neće odgovarati izvornim značajkama, no nekad nam to nije ni bitno;
- **Regularizacija** – regularizacija je postupak kojim se sprječava odabir presloženih modela pri samoj optimizaciji empirijske pogreške. Regularizacija je univerzalna ideja u strojnom učenju, i o njoj ćemo pričati u nastavku;
- **Bayesovska regresija** (odnosno, općenitije, **bayesovski odabir modela**) – bayesovski postupci u statistici i strojnom učenju oslanjaju se na ideju da se parametri modela, jednako kao i primjeri $\mathbf{x}$ i oznake y, tretiraju kao slučajne varijable, za koje je potrebno unaprijed definirati nekakve apriorne distribucije, a učenje se onda svodi na procjenu tih parametara i primjenu Bayesovog teorema kako bi se dobila aposteriorna distribucija oznake y za ulazni primjer $\mathbf{x}$. Mi na ovom predmetu (nažalost) nećemo pričati ništa o bayesovskim metodama.

8

Stanje s ovim tehnikama je sljedeće. Prva tehnika (više primjera) nije uvijek izvediva. Iduće tri tehnike se često koriste. One striktno razdvajaju fazu odabira modela od faze učenja modela. S druge strane, zadnje dvije tehnike (regularizacija i bayesovska regresija) u nekoj mjeri spajaju faze odabira modela i učenje modela.

Mi ćemo se fokusirati na **regularizaciju**, kao jednu vrlo osnovnu, vrlo učinkovitu i često korištenu tehniku u strojnom učenju.

3 Regularizacija

Početak priče o regularizaciji kreće od jednog jednostavnog opažanja: kod linearnih modela, što je model složeniji, to ima veće vrijednosti parametara $\mathbf{w}$. Uzmimo kao primjer model polinoma drugog stupnja:

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

Ako su težine w_3, w_4 ili w_5 velike magnitude (bilo pozitivne ili negativne), hipoteza će biti izrazito nelinearna. S druge strane, što su težine w_3, w_4 i w_5 bliže nuli, to je hipoteza manje nelinearna. U krajnosti, ako $w_3 = w_4 = w_5 = 0$, model efektivno degenerira u linearan model.

Iz ovoga slijedi da složenost linearnog modela regresije izravno ovisi o težinama značajki, i da će prenaučeni modeli imati visoke vrijednosti za mnoge težine. Onda, kako bismo to spriječili, mi ćemo već pri učenju modela **ograničiti magnitudu parametara**. To ćemo raditi tako da ćemo **kažnjavati** hipoteze s visokim vrijednostima parametara. I to se zove **regularizacija**.

U praksi, to izgleda tako da krenemo s relativno složenim modelom, kako bismo spriječili podnaučenost, ali onda koristimo regularizaciju kako bismo mu efektivno ograničili složenost. Dakle, krećemo od vrlo složenog, raskošnog modela, ali onda ga sputavamo, da se ne "razuzda" previše. Ako to sputavanje pametno napravimo, spriječit ćemo prenaučenost, odnosno ostvarit ćemo kompromis između jednostavnosti i složenosti modela.

Cilj regularizacije jest što više parametara (težina) pritegnuti na nulu, jer ćemo time iz složenog modela dobiti jednostavan (naravno, opet ne želimo dobiti prejednostavan model).

Ima tu još jedna prednost: ako težine pritegnemo baš na nulu, onda ćemo dobiti tzv. **rijetke modele** (engl. *sparse models*), kod kojih je puno težina (parametara) jednakih nuli. U strojnom učenju volimo rijetke modele jer su: (1) manje skloni prenaučenosti, (2) računalno jednostavniji kod predviđanja i (3) interpretabilniji – znamo koje značajke definitivno ne utječu na izlaz (što je osobito važno u statistici).

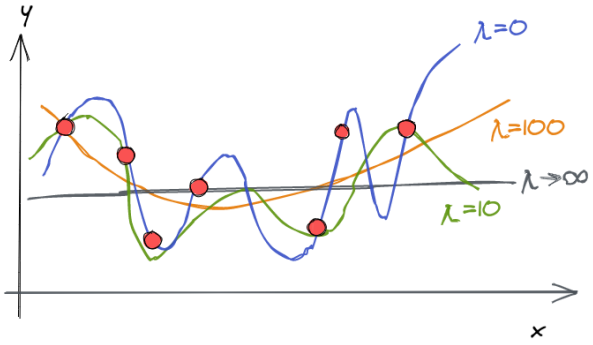
3.1 Regularizirana regresija

Pogledajmo sada kako zapravo ostvarujemo regularizaciju. Vrlo jednostavno: u funkciji pogreške (koju minimiziramo), pored empirijske pogreške, dodat ćemo još jedan član, koji karakterizira složenost modela u ovisnosti o njegovim težinama. Tako dobivamo **regulariziranu funkciju pogreške**:

$$E_R(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = E(\mathbf{w}|\mathcal{D}) + \underbrace{\lambda\Omega(\mathbf{w})}_{\text{reg. izraz}}$$

U ovom izrazu, λ je tzv. **regularizacijski faktor**. Ako $\lambda = 0$, onda se vraćamo na neregulariziranu funkciju pogreške. Veća vrijednost regularizacijskog faktora λ više će kažnjavati složenost modela i imat će za posljedicu smanjenje efektivne složenosti modela.

▸ **PRIMJER**



Treniramo model L2-regularizirane jednostavne regresije ($n = 1$) sa funkcijom preslikavanja definiranom kao polinom 10. stupnja. Razmotrimo četiri modela, koji se međusobno razlikuju po iznosu regularizacijskog faktora λ. Ako ne regulariziramo ($\lambda = 0$), polinom 10. stupnja na našem skupu od 7 primjera ostvaruje savršenu točnost. Kako povećavamo iznos regularizacijskog faktora λ, tako težine $\mathbf{w}$ sve više pritežemo k nuli, što rezultira sve zaglađenijom regresijskom krivuljom u ulaznome prostoru. Npr., polinom 10. stupnja regulariziran sa $\lambda = 100$ mogao bi u našem slučaju efektivno odgovarati polinomu drugog stupnja (paraboli). U ekstremnom slučaju, ako $\lambda \to \infty$, sve težine osim težine w_0 pritežemo k nuli, pa dobivamo pravac nagiba nula koji os y siječe na mjestu srednje vrijednosti oznaka y. Naravno, tako snažna regularizacija nije ono što u praksi želimo.

Pogledajmo sada kako bismo konkretno definirali $\Omega(\mathbf{w})$. Vrijednost tog izraza ovisi o težinama $\mathbf{w}$. Treba nam neka funkcija težina $\mathbf{w}$, i to takva da je njezina vrijednost velika, kada su težine velike, a mala, kada su težine male. Imajmo na umu da je $\mathbf{w}$ zapravo **vektor** težina. Kakva bi to bila funkcija? Odgovor je: **norma vektora**. Naime, norma je funkcija koja daje duljinu vektora, i ona će biti to veća što su veće magnitude komponenata vektora.

U linearnoj algebri postoji jedna općenita klasa vektorskih normi koja se zove p-**norma**. Općenito, dakle, regularizacijski izraz $\Omega(\mathbf{w})$ možemo definirati kao **p-normu vektora težina**:

$$\Omega(\mathbf{w}) = \|\mathbf{w}\|_p = \Big(\sum_{j=1}^{m} |w_j|^p \Big)^{\frac{1}{p}}$$

Različite p-norme možemo vizualizirati ovako:

Slika prikazuje gdje, u 3-dimenzijskom prostoru, leže točke (odnosno vrhovi vektora) koje su jednako udaljene od ishodišta (odnosno vektori koji imaju istu normu), odnosno kako izgleda (hiper)površina definirana funkcijom $\|\mathbf{w}\|_p = \text{konst}$. Za beskonačnu normu to je kocka, za 2-normu to je kugla, za 1-normu to je oktaedar, za 0-normu to su točke na vrhovima oktaedra (na osima). U višim dimenzijama imali bismo hiperkocku, hiperkuglu, hiperoktaedar odnosno točke u vrhovima hiperoktaedra.

U strojnom učenju koristimo norme sa $p = 2$ i $p = 1$, a spomenut ćemo još i normu sa $p = 0$. Njih zovemo L2-, L1-, odnosno L0-norma. Njihove definicije slijede iz gornje definicije za općenitu p-normu:

- **L2-norma** ($p = 2$), poznata i kao **euklidska norma**:

$$\|\mathbf{w}\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^{m} w_j^2} = \sqrt{\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}}$$

- **L1-norma** ($p = 1$), poznata i kao **Mahnattan-udaljenost**:

$$\|\mathbf{w}\|_1 = \sum_{j=1}^{m} |w_j|$$

- **L0-norma** ($p = 0$), koja je u stvari jednaka broju ne-nul elemenata vektora (tj. broju značajki koje nisu ukljonjene):

$$\|\mathbf{w}\|_0 = \sum_{j=1}^{m} \mathbf{1}\{w_j \neq 0\}$$

Primijetite – a to je vrlo važno – da se težina w_0 ne regularizira. Zašto? Zato što w_0 određuje pomak pravca odnosno općenito hiperravnine od ishodišta. Ako predviđamo veličinu stopala s obzirom na dob, onda sigurno ne želimo imati $w_0 = 0$, jer bi to značilo da novorođenče ima veličinu stopala jednaku nuli. 9

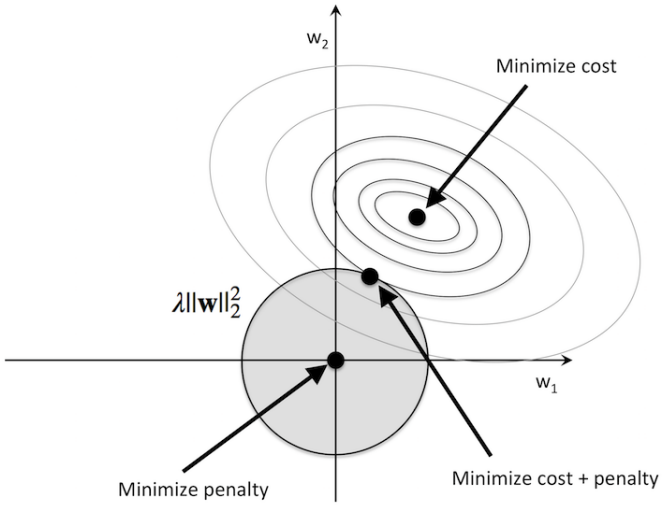
3.2 Regularizirani linearni model regresije

Pogledajmo sada kako regularizacija izgleda konkretno kod regresije. **L2-regularizacija** (ili Tikhonovljeva regularizacija) daje nam tzv. **hrbatnu regresiju** (engl. *ridge regression*):

$$E_R(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2 + \frac{\lambda}{2}\|\mathbf{w}\|_2^2$$

Primijetite da koristimo L2-normu na kvadrat, i da imamo $\lambda/2$. To dvoje, zajedno sa $1/2$ ispred sume, koristimo zbog kasnije matematičke jednostavnosti. L2-regularizacija kažnjava hipotezu onoliko koliko njezine težine odstupaju od nule u smislu kvadratnog odstupanja (što znači da će veće težine biti kažnjenje više, a manje težine će biti kažnjene manje; ova spoznaja će nam biti od koristi nešto kasnije).

L2-regularizacija ima dosta jasnu geometrijsku interpretaciju. Kao što znamo, hipoteze su funkcije definirane parametrima $\mathbf{w}$. Pogreška $E(\mathbf{w}|\mathcal{D})$ je funkcija parametra $\mathbf{w}$. Možemo pogledati kao izgleda ta funkcija u prostoru parametara:



Slika prikazuje izokonture (skup točaka u kojima funkcija poprima konstantnu vrijednost) funkcije pogreške $E(\mathbf{w}|\mathcal{D})$ u prostoru parametara $w_1 \times w_2$ (parametar w_0 smo u prikazu radi preglednosti zanemarili). Eliptične konture u gornjem desnom dijelu slike odgovaraju izokonturama neregularizirane funkcije pogreške $E(\mathbf{w}|\mathcal{D})$ definirane kao zbroj kvadrata reziduala. Ta je funkcija konkavna, i njezin je minimum u središtu izokontura. Kružnica u donjem lijevom dijelu slike odgovara izokonturi L2-regularizacijskog izraza, čiji je minimum u ishodištu (jer tada je norma vektora $\mathbf{w} = (0, 0)$ jednaka nuli). Regularizirana funkcija pogreške $E_R(\mathbf{w}|D)$ dobiva se zbrojem ovih dviju krivulja. Zbroj dviju konveksnih funkcija daje opet konveksnu funkciju. Izokonture te konveksne funkcije nisu ucrtane u gornjoj slici, ali je ucrtan njezin minimum, kao točka između minimuma neregularizirane funkcije pogreške i minimuma L2-regularizacijskog izraza (ishodišta). Na regularizaciju možemo, dakle, gledati kao na privlačenje točke minimuma bliže ishodištu.

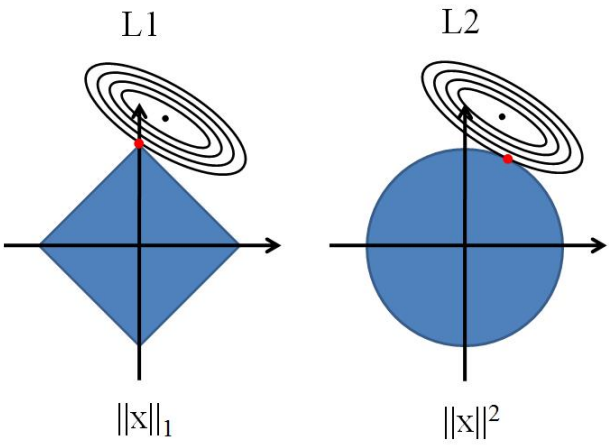
Umjesto L2-regularizacije, možemo odlučiti raditi **L1-regularizaciju** ili **LASSO regularizaciju** (engl. *least absolute shrinkage and selection operator*):

$$E_R(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2 + \frac{\lambda}{2}\|\mathbf{w}\|_1$$

L1-regularizacija kažnjava hipotezu onoliko koliko njezine težine odstupaju od nule po apsolutnoj vrijednosti.

Koja je razlika između L2- i L1-regularizacije? Razlika se vidi kod malenih težina, koje su blizu nule. L1-regularizacija nema kvadrat, pa će te malene težine kažnjavati više od L2-regularizacije. S druge strane, L2-regularizacija će male težine kažnjavati vrlo malo, i zapravo će ih vrlo teško dotjerati skroz do nule. Zbog toga će L1-regularizacija općenito rezultirati modelima kod kojih je više težina pritegnuto baš na nulu, tj. rezultirat će **rjeđim modelima** nego L2-regularizacija.

Razlika između L2- i L1-regularizacije može se protumačiti i grafički, u prostoru parametara:



Slika prikazuje L1-regularizaciju (lijevo) i L2-regularizaciju (desno). Izokonture L1-regularizacijskog izraza su općenito hiperoktaedar, odnosno u dvodimenzijskome prostoru parametara to je kvadrat. Izokonture L2-regularizacijskog izraza su hipersfere, odnosno u dvodimenzijskome prostoru parametara to je kružnica. Slika prikazuje da će se, kod L1-regularizacije, zato što regularizacijski izraz nije obao nego ima vrhove, lakše dogoditi da se minimum regularizirane funkcije pogreške nađe na nekoj od koordinatnih osi prostora parametara, tj. u jednom od vrhova kvadrata (jer vrhovi su na osima). Nadalje, ako se minimum nalazi na nekoj od osi prostora parametara, to onda znači da je druga koordinata (tj. težina) jednaka nuli. U trodimenzijskom prostoru parametara izokontura je oktaedar te, ako se minimum nađe u nekom od vrhova oktaedra, onda će druge dvije težine biti jednake nuli. Ako se minimum nađe na bridu oktaedra, onda će jedna težina biti jednaka nula. U višedimenzijskom prostoru, svaki puta kada se minimum nađe na vrhu ili na bridu hiperoktaedra, određeni broj težina će biti jednak nuli. U višedimenzijskom prostoru raste vjerojatnost da se to dogodi, jer hiperoakteader ima sve više vrhova i bridova. Iz toga onda zaključujemo da L1-regularizacija lakše dovodi do rijetkih modela (mnoge težine su pritegnute na nulu) nego L2-regularizacija.

Konačno, možemo razmišljati i o **L0-regularizaciji**, kod koje je pogreška definirana ovako:

$$E_R(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}\right)^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{m}\mathbf{1}\{w_j \neq 0\}$$

L0-regularizacija kažnjava hipotezu onoliko koliko ima ne-nul značajki. Zapravo, efektivno, L0 regularizacija odabire najbolji podskup značajki, što znači da zapravo radi postupak **odabira značajki** (engl. *feature selection*).

Sada se ovdje nameće pitanje: koja regularizacija je najbolja? Odgovor je: u načelu preferiramo onu regularizaciju koja nam daje što rjeđe modele. To bi bila dakle L0, a onda L1, a onda tek L2. Međutim, problem u praksi predstavlja računalna složenost. Naime, L0-regularizacija je **NP-potpun problem** i nema traktabilno rješenje (treba isprobati sve kombinacije značajki, a njih je 2^m). S druge strane, L1-regularizacija je traktabilna, ali **nema rješenje u zatvorenoj formi**. Kod linearnog modela regresije, jedino L2-regularizacija ima rješenje u zatvorenoj formi.

Mi ćemo u nastavku pogledati L2-regulariziranu regresiju (odnosno hrbatnu regresiju), baš zato što optimizacija ima analitičko rješenje. Ta se regresija vrlo često koristi u praksi. U praksi se također koristi i L1-regularizacija (koja nema analitičko rješenje, pa se optimizacija radi iterativno), ili kombinacija L1-regularizacije i L2-regularizacije, koja se zove **elastična mreža** (engl. *elastic net*). Ali o tome nećemo.

3.3 Hrbatna regresija: optimizacija

Kao što smo rekli, L2-regularizirana regresija, odnosno hrbatna regresija, ima rješenje u zatvorenoj formi. Lako ga je izvesti. Pogledajmo kako.

Prisjetimo se: ovako smo izveli rješenje za težine $\mathbf{w}$ za neregularizirani linearan model regresije:

$$\begin{aligned} E(\mathbf{w}|\mathcal{D}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{\Phi w} - \mathbf{y})^{\mathrm{T}}(\mathbf{\Phi w} - \mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi w} - 2\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi w} + \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}) \end{aligned}$$

i zatim, da bismo našli minimum, izračunali smo gradijent ove funkcije, izjednačili ga s nulom, i iskazali $\mathbf{w}$:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{w}} E &= \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi w} - \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \\ \mathbf{w} &= (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \end{aligned}$$

Sada ćemo raditi isto kao i prije, samo ćemo funkciji pogreške dodati regularizacijski faktor (označeno crvenom):

$$\begin{aligned} E_R(\mathbf{w}|\mathcal{D}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{\Phi w} - \mathbf{y})^{\mathrm{T}}(\mathbf{\Phi w} - \mathbf{y}) + \frac{\lambda}{2}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi w} - 2\mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi w} + \mathbf{y}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} + \lambda\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w}) \end{aligned}$$

Sada računamo gradijent funkcije, izjednačavamo ga s nulom, i iskazujemo $\mathbf{w}$:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{w}} E_R &= \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi w} - \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} + \lambda\mathbf{w} \\ &= (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi} + \lambda\mathbf{I})\mathbf{w} - \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} = 0 \\ \mathbf{w} &= (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi} + \lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} \end{aligned}$$

Ovdje smo iz matričnog diferencijalnog računa iskoristili jednakosti $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{x}}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})$, gdje je $\mathbf{A} = \mathbf{I}$, pa onda $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\mathbf{w}}\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{w} = 2\mathbf{w}^{\mathrm{T}}$.

Matrica $\lambda\mathbf{I}$ je matrica dimenzija $(m+1) \times (m+1)$ koja na dijagonali ima λ, a izvan dijagonale nule, i dodavanjem te matrice na Gramovu matricu efektivno se ostvaruje regularizacija. Međutim, prisjetimo se da težinu w_0 želimo izuzeti iz regularizacije. To znači da je matrica $\lambda\mathbf{I}$ zapravo definirana tako da je, pored elemenata izvan dijagonale, i gornji lijevi element jednak nuli, tj. $\lambda\mathbf{I} = \mathrm{diag}(0, \lambda, \ldots, \lambda)$.

Vidimo da se regularizacija lijepo "ugradila" u rješenje najmanjih kvadrata. Rješenje doduše više nije izravno pseudoinverz Gramove matrice $\mathbf{\Phi}$, nego treba računati inverz zbroja Gramove matrice i matrice koja na dijagonali ima regularizacijski faktor λ. Ovo je trivijalno proširenje u računalnom smislu. Međutim, zanimljivo je kako se regularizacija svela na dopunu vrijednosti na dijagonali Gramove matrice. I tu možemo ispričati jednu zanimljivu priču...

4 Regularizacija i kondicija matrice

Vratimo se malo na računanje inverza matrice dizajna $\mathbf{\Phi}$, o kojemu smo kratko pričali prošli put. Rekli smo da inverz ne možemo računati direktno, jer se lako može dogoditi da broj primjera i broj parametara nisu jednaki, što znači da će sustav jednadžbi biti **preoodređen ili pododređen**, odnosno da matrica dizajna neće biti kvadratna, pa da nema inverz. Štoviše, rekli smo da čak i ako je matrica dizajna kojim čudom kvadratna, i dalje može biti da nema inverz, ako odgovarajući sustav jednadžbi nije konzistentan ili ako ima višestruka rješenja. Rješenje smo onda našli u postupku najmanjih kvadrata, koji nas je vrlo brzo doveo do **pseudoinverza** matrice dizajna:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

Rekli smo i da pseudoinverz uvijek postoji. Čak i onda kada ne možemo izračunati inverz Gramove matrice, pseudoinverz možemo izračunati postupkom rastava na singularne vrijednosti (SVD). Međutim, to ne znači da to uvijek želimo.

Kada možemo izračunati pseudoinverz pomoću inverza Gramove matrice? Gramova matrica je dimenzija $(m+1) \times (m+1)$, tj. sigurno je kvadratna. Ali, da bismo je mogli invertirati, Gramova mora biti i punog ranga. Kada će Gramova matrica biti punog ranga? Kao što smo spomenuli prošli put, rang Gramove matrice jednak je rangu matrice dizajna. To znači da će Grammova matrica biti punog ranga ako i samo je rang matrice dizajna $(m+1)$, tj. ako u matrici dizajna imamo $(m+1)$ linearno nezavisnih stupaca, odnosno ako su sve značajke **linearno nezavisne**. Nažalost, u praksi, naš problem su često baš linearno zavisni stupci. Zašto dolazi do toga? Zato što se često događa da imamo **redundante značajke**.

▸ **PRIMJER**

Npr., ako radimo predviđanje osobnog prihoda, a kao značajke imamo dob osobe u danima te kao drugu značajku dob osobe u godinama, onda su te dvije značajke linearno gotovo savršeno povezane. Matrica dizajna $\mathbf{\Phi}$ u tom slučaju je, npr.:

$$\mathbf{\Phi} = \begin{pmatrix} 1 & 9511 & 26 \\ 1 & 11340 & 31 \\ 1 & 8201 & 22 \\ 1 & 18022 & 49 \end{pmatrix}$$

Prvi stupac je "dummy" značajka $x_0 = 1$, drugi stupac je značajka x_1 koja odgovara starosti osobe u broju dana, a treći stupac je značajka x_2 koja odgovara starosti osobe u godinama. Drugi i treći stupac su linearno zavisni: treći stupac možemo dobiti iz drugog tako da drugi podijelimo sa 365.25 i zaokružimo na niži cijeli broj. Ovo nije savršena linearna zavisnost (jer zaokružujemo, tj. zato što je broj dana preciznija informacija nego broj godina), ali je dovoljno blizu savršenoj linearnoj zavisnosti da bi u praksi bila problematična. Ako ne bismo zaokruživali, već godine prikazali kao realan broj, imali bismo savršenu linearnu zavisnost drugog i trećeg stupca.

Ovakav fenomen zovemo **multikolinearnost**: dvije ili više ulaznih varijabli su korelirane, pa je neku varijablu moguće vrlo dobro predvidjeti kao linearnu kombinaciju jedne ili više drugih varijabli. Ekstremni slučaj multikolinearnosti je **savršena multikolinearnost**, kao u prethodnom primjeru (ako ne bismo zaokruživali broj godina). U praksi je ipak realnije da su varijable multikolinearne, no ne savršeno. Npr., ako radimo predviđanje osobnog prihoda na temelju dobi i na temelju godina radnog staža, onda bi te dvije varijable mogle biti vrlo visoko korelirane. 10

Vratimo se sada na našu matricu dizajna. Što se događa ako je neka značajka savršena linearna kombinacija jedne ili više drugih značajki? To onda znači da matrica dizajna $\mathbf{\Phi}$ nema rang $m+1$. Dalje, Gramova matrica (matrica skalarnih produkata) $\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}$ ima isti rang kao i matrica dizajna, pa dakle niti ona neće imati puni rang. To onda znači da Gramova matrica nema inverz, tj. **singularna** je. Ako baš želimo, možemo izračunati pseudoinverz od $\mathbf{\Phi}$ SVD-om, no problem je da će naše rješenje tada biti vrlo **nestabilno**. Što mislimo pod time? Mislimo da je rješenje za $\mathbf{w}$ biti **vrlo osjetljivo na promjene vrijednosti ulaznih varijabli**. Vrlo mala promjena ulaznih varijabli može dati vrlo veliku promjenu u težinama.

Što ako su značajke **multikolinearne**, ali nisu savršeno multikolinearne? Onda je matrica dizajna punog ranga, i Gramova matrica također, pa dakle nije singularna, i možemo izračunati inverz Gramove matrice, dakle možemo izračunati pseudoinverz pomoću inverza matrice. Međutim, trebamo znati da je tada Gramova matrica vrlo blizu tome da bude singularna, pa će naše rješenje opet biti vrlo **nestabilno**.

Nestabilnost rješenja je tipično ponašanje koje opažamo kod **prenučenih hipoteza**. Kod regresije, to znači da ćemo za male promjene u označenom skupu podataka imati radikalno različite izlaze. Npr., ako koristimo polinom 10. stupnja, imat ćemo vrlo različite hipoteze

ovisno o malim promjenama u ulazu. Pogledajte opet primjer s predviđanjem cijena nekretnina u Bostonu. Tamo smo imali polinom 6. stupnja, čija krivulja će jako divljati za male promjene u ulaznim podatcima. To znači da za male promjene u matrici dizajna hipoteza $h(x; \mathbf{w})$ imati vrlo različite parametre $\mathbf{w}$. To je znak prenaučenosti modela.

Srećom, u numeričkoj matematici postoji način da detektiramo ovakvu nestabilnost rješenja. U numeričkoj matematici govorimo o **kondicijskom broju** matrice. Ovdje nemamo vremena ulaziti u detalje, ali je dovoljno da znate da kada je taj broj velik, onda je naše rješenje nestabilno i model je sigurno prenaučen ili jednostavno numerički pogrešan. Za takvu matricu kažemo da je **pogrešno kondicionirana** (engl. *ill-conditioned*).

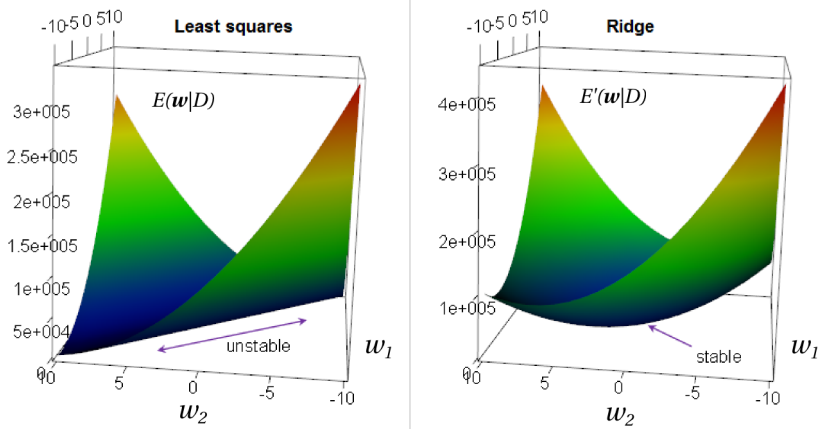
Mi svakako želimo izbjeći situaciju prenaučenosti modela. Primijetimo da, ako je model složen, a podatka je malo, dakle $m \geqslant N$, onda se lako dovodimo u situaciju prenaučenosti. Naime, onda će matrica dizajna biti **"široka i plitka"**, rang matrice će sigurno biti manji od $(m + 1)$, tj. bit će najviše N, Gramove matrice također, i sigurno imamo multikolinearnost!

Kako izbjeći multikolinearnost? Prvo, prije treniranja modela strojnog učenja uvijek je dobro analizirati korelacije između parova značajki te izbaciti one koje su redundantne. To je jedno rješenje. Drugo rješenje nam je već poznato: **regularizacija**! Pogledajmo, sada kada znamo što je ovdje problem s kondicioniranjem matrice, što zapravo regularizacija radi našoj Gramovoj matrici:

$$\mathbf{w} = (\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi} + \lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$$

Vidimo da svakom stupcu Gramove matrice dodajemo vrijednost λ na drugom mjestu (tj. u drugom retku). Ako su stupci bili linearno zavisni ili skoro linearno zavisni, sada će biti manje linearno zavisni. Što je vrijednost λ veća, to je matrica koju invertiramo "sličnija" dijagonalnoj matrici, to je manja multikolinearnost, i to smo dalje od singularne matrice. U krajnosti, kada je matrica dominantno dijagonalna, sigurno nemamo multikolinearnosti. Ovime smo zapravo popravili kondiciju Gramove matrice (smanjili kondicijski broj), odnosno kažemo da smo **rekondicionirali** Gramovu matricu. 11

Konačno, zanimljivo je pogledati koji je efekt rekondicioniranja matrice na oblik **funkcije pogreške** u prostoru parametara: 12



Slike prikazuju graf funkcije pogreške $E(\mathbf{w}|\mathcal{D})$ regresije (definirane, sjetimo se, preko kvadratne funkcije gubitka) u prostoru parametara $w_1 \times w_2$ (opet, radi preglednosti, tj. da bismo uopće mogli nacrtati graf, izostavili smo težinu w_0, no znamo da po njoj također optimiziramo, premda ju ne regulariziramo). Kao i uvijek, tražimo vektor težina $\mathbf{w}$ koji minimizira pogrešku. Na lijevoj slici je neregularizirana empirijska pogreška, tj. funkcija koju minimiziramo postupkom najmanjih kvadrata, a na desnoj slici je regularizirana empirijska pogreška, tj. funkcija koju minimiziramo kod hrbatne regresije (a to odgovara kriteriju najmanjih kvadrata plus regularizacijski izraz). Kod neregularizirane pogreške vidimo da se minimum nalazi u udolini. Zapravo, događa se to da sve točke u toj udolini, koja ovdje na slici odgovara pravcu, imaju jednaku

vrijednost, dakle imamo beskonačno mnogo točaka u kojima funkcija pogreške poprima minimum. Tu udolinu zovemo **"hrbat"**: područje nestabilnog rješenja, gdje je moguće beskonačno mnogo rješenja. Na desnoj slici vidimo regulariziranu funkciju pogreške. Efekt regularizacije, odnosno kondicioniranja matrice dizajna, jest taj da funkcija pogreške postaje "koveksnija". Time se smanjuje nestabilnost rješenja, i zapravo dovodimo se u situaciju da postoji samo jedan minimum. Također, intuitivno je jasno da, što je konveksnija funkcija pogreške, tj. što jača regularizacija, to će rješenje biti stabilnije. I upravo to je razlog zašto L2-regularizirana regresija nazivamo **hrbatna regresija**: jer može raditi sa takvim "hrptovima" (odnosno udolinama). 13

Što je poanta ove priče? Jedna vrlo konkretna poanta jest da na regularizaciju možemo gledati kao na popravljanje Gramove matrice, koje nas odmiče od nestabilnih rješenja (prenaučenih hipoteza). Druga, šira poanta priče jest da u strojnom učenju na jednu te istu stvar često možemo gledati na više različitih, međusobno povezanih načina. Jedna od glavnih svrha ovog predmeta jest da vam to osvijestimo.

5 Napomene

Razmotrimo nekoliko općenitih napomena u vezi linearnog modela regresije.

- Magnituda parametra w_i odgovara **važnosti značajke**, a predznak upućuje na njezin utjecaj (pozitivan ili negativan) na izlaznu vrijednost.
- Međutim, ako je model prenaučen (postoje multikolinearne značajke), onda magnituda parametra ne znači ništa. U tom slučaju, dobro je koristiti regularizaciju.
- Regularizacija **sprječava prenaučenost** na način da smanjuje složenost modela prigušujući vrijednosti pojedinih značajki, odnosno efektivno ih izbacuje (kada $w_j \to 0$).
- Ako je model nelinearan, regularizacijom smanjujemo nelinearnost.
- Težinu w_0 treba izuzeti iz regularizacijskog izraza (jer ona definira pomak) ili treba centrirati podatke tako da $\overline{y} = 0$, jer onda $w_0 \to 0$.
- L2-regularizacija kažnjava težine proporcionalno njihovom iznosu (velike težine više, a manje težine manje). Teško će parametri biti pritegnuti baš na nulu. Zato L2-regularizacija ne rezultira rijetkim modelima.
- L1-regularizirana regresija rezultira rijetkim modelima, ali nema rješenja u zatvorenoj formi (međutim, mogu se koristiti iterativni optimizacijski postupci).
- Regularizacija je korisna kod modela s puno parametara, jer je takve modele lako prenaučiti.
- Regularizacija smanjuje mogućnost prenaučenosti (i multikolinearnosti), ali ostaje problem odabira hiperparametra λ. Kao što već sigurno pogađate, taj se odabir najčešće radi **unakrsnom provjerom**. Koju optimalnu vrijednost za λ bismo dobili kada bismo optimizaciju radili na skupu za učenje? Odgovor je da bismo bismo sigurno odabrali $\lambda = 0$, jer to daje najsloženiji model koji bi imao najmanju pogrešku na označenom skupu primjera za učenje. I to naravno ne bi bilo dobro. Zato ćemo λ odabrati unakrsnom provjerom. 14

Sažetak

- **Linearan model regresije** linearan je u parametrima
- Nelinearnost regresijske funkcije ostvaruje se preslikavanjem iz ulaznog prostora u **prostor značajki** pomoću nelinearnih **baznih funkcija**
- Parametri linearnog modela uz kvadratnu funkciju gubitka imaju rješenje u zatvorenoj formi u obliku **pseudoinverza matrice dizajna**, neovisno o preslikavanju

- **Regularizacija smanjuje prenaučenost** ugradnjom dodatnog izraza u funkciju pogreške kojim se kažnjava složenost modela
- **L2-regularizirana regresija** ima rješenje u zatvorenoj formi, te efektivno **rekondicionira** matricu dizajna odnosno **uklanja multikolinearnost** značajki

Bilješke

[1] Ovo predavanje je lepršavija varijanta poglavlja o regresiji iz (nedovršene) skripte: `http://www.fer.unizg.hr/_download/repository/SU-Regresija.pdf`.

[2] U jeziku numeričke matematike, uporaba polinomijalne funkcije za modeliranje nelienarnosti funkcije $h(x; \mathbf{w})$ jest problem **polinomijalne interpolacije**. Jedna alternativa polinomijalnoj interpretaciji, a koja se vrlo često koristi u statistici, jest interpolacija pomoću **spline funkcija**. Spline funkcija je funkcija koja je definirana po dijelovima pomoću funkcije polinoma. Interpolacija pomoću spline funkcije daje slične rezultate kao i polinomijalna interpolacija, ali je rezultat stabilniji, u smislu da, za razliku od polinomijalne funkcije, spline funkcije ne dovode do oscilacija pri rubovima interpolacijskog intervala (tzv. **Rungeov fenomen**), što je u stvari manifestacija **prenaučenosti modela**. U statistici se dominantno koriste **ograničene (prirodne) kubne spline funkcije** (engl. *restricted (natural) cubic splines*), koje su po dijelovima definirane kao polinom trećeg stupnja, uz dodatnu ogradu da je spline funkcija linearna prije prvog segmenta i na kraju zadnjeg segmenta. Više ovdje: `http://fourier.eng.hmc.edu/e176/lectures/ch7/node6.html`.

[3] Ideja da umjesto modela mijenjamo podatke podsjeća na priču o plavom i ružićastom slonu: Kako upucati plavog slona? Puškom za plave slonove. Kako upucati ružićastog slona? Zadaviti slona dok ne poplavi, onda ga upucati puškom za plavog slona. (Niti jedan slon nije nastradao u ovoj lošoj šali.) Manje nasilan primjer: utrkujete se, imate fiću i loš je u zavojima. Umjesto da pređete na bolid, ostanite u fići, ali izravnajte cestu.

[4] Nameće se pitanje: možemo li preslikavati u prostor niže dimenzije, tj. da je $m < n$? Možemo, naravno. Metode **redukcije dimenzionalnosti** (koje nećemo raditi na ovom predmetu), poput PCA i MSD, zapravo preslikavaju u prostor niže dimenzije, s ciljem da u tom prostoru podatci budu bolje objašnjivi i/ili da model bude manje sklon prenaučenosti. Također, možemo preslikavati u prostor značajki koji je iste dimenzije kao i ulazni prostor (tj. $m = n$); takav primjer imat ćemo u zadatcima za vježbu na temu **jezgrenih funkcija** (V10, zadatak 2), koje služe za implicitno preslikavanje u prostor značajki. Međutim, ako je naš cilj ostvariti nelinearnost (tj. nelinearnu granicu između klasa kod klasifikacije, odnosno nelinearnu regresijsku funkciju kod regresije), premda je moguće da nelinearnim preslikavanjem u prostor iste ili manje dimenzije ostvarimo željenu nelinearnost, vjerojatnije je da ćemo to ostvariti ako preslikavamo u prostor veće dimenzije. Ova je intuicija iskazana **Coverovim teoremom**, v. `https://en.wikipedia.org/wiki/Cover%27s_theorem`. Ako vas zanimaju koji su drugi važni teoremi strojnog učenja, pogledajte ovu raspravu: `https://stats.stackexchange.com/q/321851/93766` (na ovom predmetu spomenut ćemo, bez ulaska u detalje, tri od ovdje navedenih teorema).

[5] Dakle, pazite: **linearan model regresije** $\neq$ **model linearne regresije**. Vidjet ćemo tijekom semestra da je strojno učenje puno takvih teminoloških mina kojima je lako zbuniti protivnika. Svako znanstveno područje ima svojih terminoloških muka, a pogotovo ona koja u kojima se stapaju utjecaji više drugih područja i istraživačkih zajednica, kao što je to slučaj sa strojnim učenjem. No, kad god postoji mogućnost terminološke zabune, mi ćemo to posebno istaknuti.

[6] Primijetite da, kada govorimo o dimenziji ulaznog prostora ili prostora značajki, "dummy" značajku x_0 odnosno $\phi_0(\mathbf{x})$ ne brojimo kao zasebnu dimenziju. Tako, naprimjer, kažemo da preslikavanje $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (1, x_1, x_2, x_1x_2, x_1^2, x_2^2)$ inducira 5-dimenzijski (a ne 6-dimenzijski) prostor značajki. Ovo je pitanje konvencije. Naime, ako je model definiran kao $h(\mathbf{x}) = w_0 + w_1x_1 + \cdots + w_nx_n$, onda je on zapravo **afina funkcija** u $\mathbb{R}^n$. No, svaka se afina funkcija u $\mathbb{R}^n$ može napisati kao **homogena linearna funkcija** u $\mathbb{R}^{n+1}$ primijenjena na transformaciju koja dodaje "dummy" jedinicu vektoru značajki $\mathbf{x}$, i onda imamo $h(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$. O homogenim funkcijama: `https://en.wikipedia.org/wiki/Homogeneous_function`.

[7] Prema **Lagrangeovom interpolacijskom teoremu**, za skup $\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_N, y_N)\}$ od N primjera postoji jedinstven polinom $h(x)$ stupnja ne većeg od $N-1$ za koji vrijedi $h(x^{(i)}) = y^{(i)}$ za $i = 1, \ldots, N$, tj. taj polinom prolazi kroz svaku točku iz $\mathcal{D}$ (v. `https://en.wikipedia.org/wiki/Polynomial_interpolation#Interpolation_theorem`). U primjeru s nekretninama iz Bostona, za ovaj konkretan skup od 8 točaka dovoljan je već polinom stupnja 6.

[8] Dobar uvod u **bayesovsku regresiju** možete naći u Bishopovoj knjizi, poglavlju 3.3 [Bishop, 2006]. Štovateljima R-a mogao bi se svidjeti i poglavlje o bayesovskoj regresiji iz online knjige [Clyde et al., 2018], dostupno na `https://statswithr.github.io/book/introduction-to-bayesian-regression.html`. Standardna referenca za bayesovske statističke metode općenito je [Gelman et al., 2013]. Za kraći uvod u **bayesovski odabir modela**, pogledajte [Bishop, 2006], poglavlje 3.4, ili `https://www.cse.wustl.edu/~garnett/cse515t/fall_2019/files/lecture_notes/7.pdf`. Vrlo dobar pregled postupaka daju [Hooten and Hobbs, 2015].

[9] Alternativno, možemo centrirati podatke (npr., standardizacijom), tako da ih dovedemo do ishodišta, i onda je $w_0 = 0$.

[10] **Savršena multikolinearnost** događa se kada radimo na sirovim podatcima, koji često koriste redundantne značajke. Kada se reduntantne značajke uklone, često se događa da su preostale varijable (nesavršeno) multikolinearne (zbog inherentnih korelacija u podatcima).

[11] Matematički gledano, dodajemo lambdu na **svojstvene vrijednosti** Gramove matrice, pa će sve svojstvene vrijednosti biti različite od nule, pa onda matrica neće biti singularna. Tehnički gledano, može se dogoditi da matrica nije imala multikolinearnosti, ali da smo upravo dodavanjem lambdi na dijagonalu doveli matricu do pogrešne kondicioniranosti. To je moguće, ali u praksi dosta malo vjerojatno.

[12] Uz manje izmjene, slika sam preuzeo sa `https://stats.stackexchange.com/a/151351/93766`.

[13] U geologiji, hrbat (greben) je izbočeni i izduženi dio brda. Budući da mi tražimo minimum a ne maksimum, zapravo umjesto hrpta imamo "negativan hrbat" iliti udolinu. Usput, ako vas muči kao što muči mene, ovdje je deklinacija riječi "hrbat": `http://hjp.znanje.hr/index.php?show=search_by_id&id=fVxvWhQ%3D`.

[14] Pažljivi čitatelj ovdje će možda primijetiti moguću cirkularnost: regularizaciju smo predstavili kao tehniku za sprječavanje prenaučenosti koja je alternativa unakrsnoj provjeri, i kod koje se složenost modela prilagođava podatcima, no sada ispada da ipak treba unakrsna provjera da bismo optimizirali hiperparametar λ (regularizacijski faktor). Točno je da nam unakrsna provjera ipak treba. Međutim, to ne umanjuje korisnost regularizacije. Naime, optimizacijom hiperparametra λ mi modelu dopuštamo da svoju složenost više ili manje prilagodi podatcima, ali mu i dalje dajemo slobodu na koji način da se prilagodi (koje težine više a koje manje pritegnuti nuli). U tom smislu, odabir hiperparametra λ, za razliku od izravnog odabira modela, je na neki način "soft" odabir modela, gdje ostavljamo mogućnost da se složenost modela bolje prilagodi podatcima. Druga prednost regularizacije nad izravnom optimizacijom hiperparametara vidi se u situacijama kada model ima više hiperparametara: tada nam je lakše optimizirati samo jedan "master" hiperparametar (regularizacijski faktor λ) nego više hiperparametara odjednom.

Literatura

C. M. Bishop. *Pattern recognition and machine learning*. Springer, 2006.

M. Clyde, M. Ç. Rundel, C. Rundel, D. Banks, C. Chai, and L. Huang. An introduction to bayesian thinking, 2018.

A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, and D. B. Rubin. *Bayesian data analysis*. CRC press, 2013.

M. B. Hooten and N. T. Hobbs. A guide to bayesian model selection for ecologists. *Ecological Monographs*, 85(1):3–28, 2015.