Analýza dat: lineární regrese, detekce shluků

Radek Pelánek

IV122

Úvodní poznámky

- princip „simulovaná data“
- rozbor dvou konkrétních technik
  - lineární regrese
  - detekce shluků (k-means)
- průběžně ilustrace obecných principů z analýzy dat, pravděpodobnosti, strojového učení, …

Simulovaná data – jednoduchý příklad

- zvolíme parametry μ, σ, počet dat n
- simulovaná data $=$ vygenerujeme n bodů z normálního rozdělení s průměrem μ a směrodatnou odchylkou σ
- na základě dat odhadneme parametry m, s

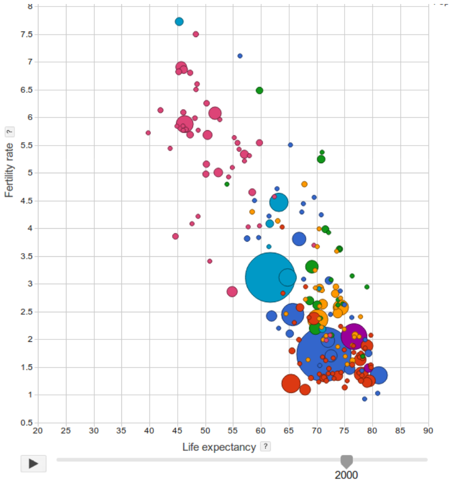
Simulovaná data – jednoduchý příklad

- zvolíme parametry μ, σ, počet dat n
- simulovaná data $=$ vygenerujeme n bodů z normálního rozdělení s průměrem μ a směrodatnou odchylkou σ
- na základě dat odhadneme parametry m, s

co z toho:

- ujasnění metod pro odhad parametrů
- kontrola implementace
- intuitivní vhled do vztahu mezi n a přesností odhadnutých parametrů
- u složitějších modelů i „přidané“ výsledky, které nelze (snadno) získat analyticky

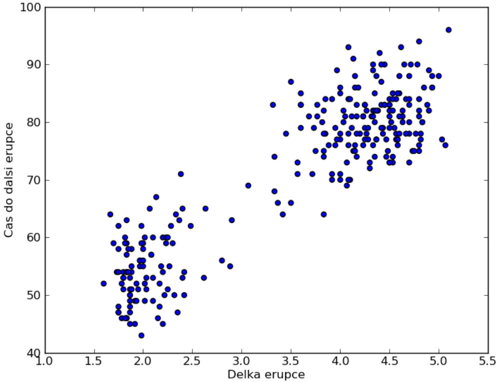
Reálná data: délka života, porodnost



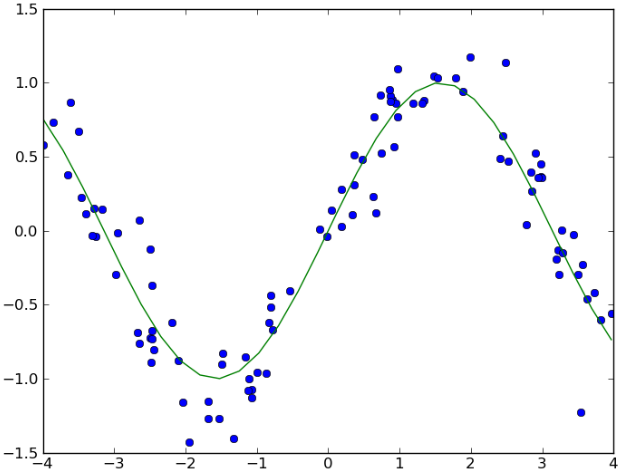
Google Public Data / World Bank

Reálná data: Old Faithful

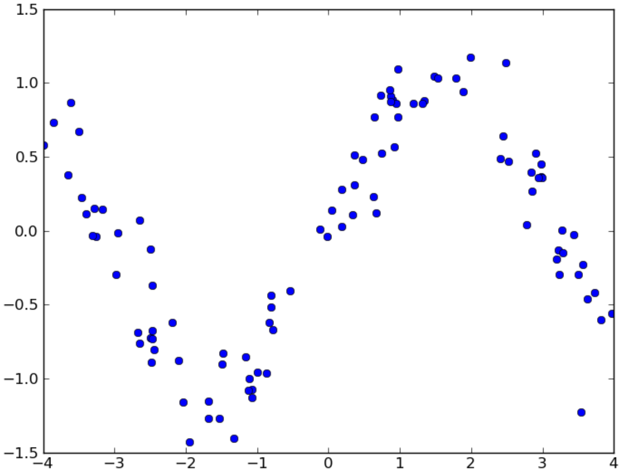
Zdroj: Wikipedia



Simulovaná data: generování



Simulovaná data: vstup pro analýzu



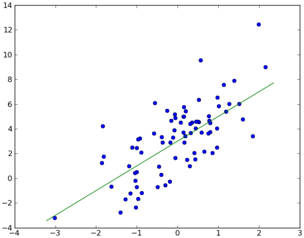
Simulovaná data

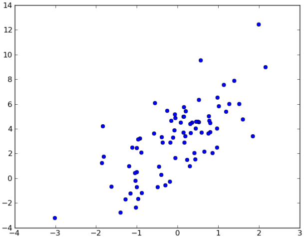
též „syntetická“ data

- zvolíme „správné řešení“
- vygenerujeme data: „správné řešení“ + náhodný šum
- náhodný šum $\sim$ normální rozdělení (většinou)
- algoritmu pro analýzu dat dáme pouze vygenerovaná data
- výsledek algoritmu můžeme porovnat se správným řešením

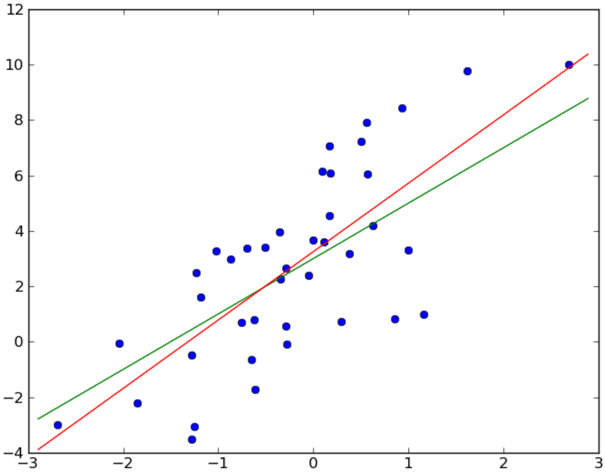
užitečný přístup z mnoha hledisek: pochopení, ladění implementace, nastavení parametrů

Simulovaná data: lineární regrese

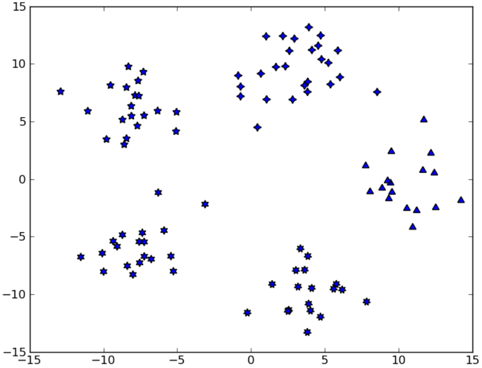




Lineární regrese



Simulovaná data: Detekce shluků



Úkol

- k dispozici data pro lineární regresi a detekci shluků
- zkuste najít „co nejlepší“ přímku / rozdělení na shluky
  1. co to znamená „co nejlepší“?
  2. jak hledat?
- zkuste vymyslet ...
  žádný Google, Wikipedie, studijní materiály

Která přímka je nejlepší?

- hledáme co nejlepší přímku $ax + b$
- minimalizace „sumy čtverců chyb" (sum of squared error)

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2$$

- proč zrovna tato funkce?

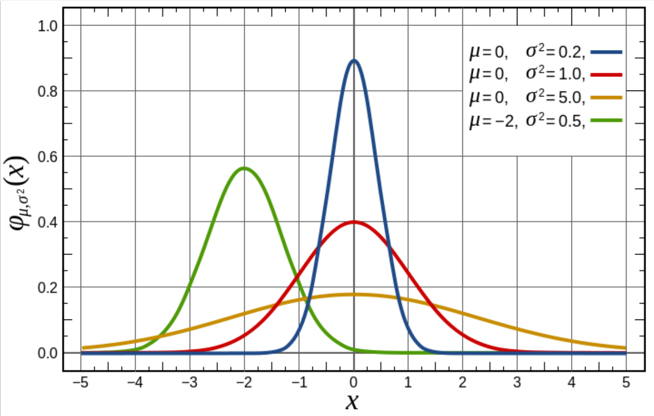
Která přímka je nejlepší?

- hledáme co nejlepší přímku $ax + b$
- minimalizace „sumy čtverců chyb“ (sum of squared error)

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2$$

- proč zrovna tato funkce?
- pragmaticky: dobře se s tím pracuje
- teoreticky: nejlepší vysvětlení dat při předpokladu normálního šumu

Normální rozdělení



Wikipedia

Normální rozdělení

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- μ – průměr
- σ – standardní odchylka

Metoda maximální věrohodnosti

maximum likelihood estimation

- jaká je věrohodnost (likelihood) dat, pokud jsou generována přímkou $ax + b$?

$$L = \prod_i p(x_i, y_i) = \prod \mathcal{N}(ax_i + b, \sigma^2)(y_i)$$

- hledáme a, b tak, abychom maximalizovali
- vezmeme logaritmus (monotónní operace, zachovává maximum)
- maximalizovat L je to stejné jako minimalizovat sumu čtverců:

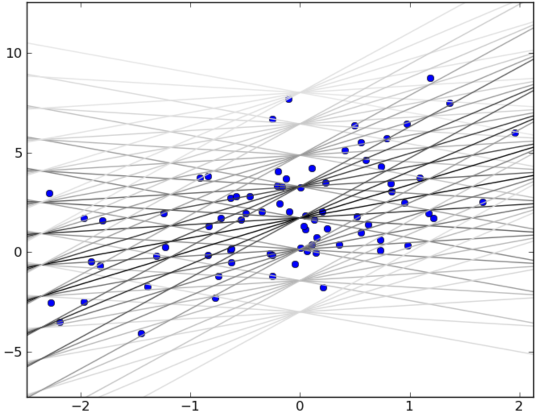
$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2$$

Jak najít přímku minimalizující SSE?

- analytické řešení „vzorečkem“ – ideální řešení, tady funguje, u složitějších problémů však nikoliv
- pro ilustraci:
    - „grid search“ – hrubá síla
    - gradient descent – postupné vylepšování

Grid search

8 hodnot b, 7 hodnot a; stupeň šedi $\sim$ SSE



Analytické řešení

$$SSE = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2$$

- hledáme minimum vzhledem k a, b
- parciální derivace musí být 0

$$\frac{SSE}{\partial a} = 2 \sum_{i=1}^{n} -y_i x_i + a x_i^2 + x_i b = 0$$

$$\frac{SSE}{\partial b} = 2 \sum_{i=1}^{n} -y_i + a x_i + b = 0$$

Analytické řešení

Po algebraických úpravách dostaneme:

$$a = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} = r_{xy} \frac{s_y}{s_x}$$

$$b = \bar{y} - a\bar{x}$$

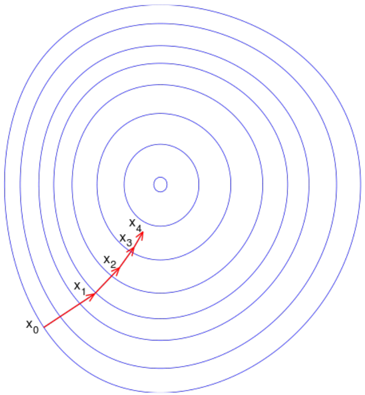
r_{xy} – korelační koeficient
s_x, s_y – standardní odchylka x, y

Metoda největšího spádu

gradient descent

- „hladová“ metoda
  - začneme s iniciálním odhadem parametrů
  - iterativně zlepšujeme
- snažíme se o co největší lokální zlepšení = úprava hodnot parametrů ve směru spádu (gradient)
- parametr „learning rate“: velikost skoku ve směru gradientu
  - příliš malý – pomalé
  - příliš velký – nestabilní (nekonverguje)

Gradient descent: intuice



Wikipedia

Gradient descent pro lineární regresi

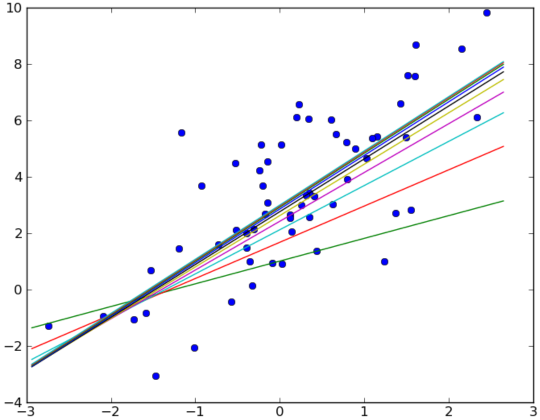
$$SSE = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))^2$$

gradient:

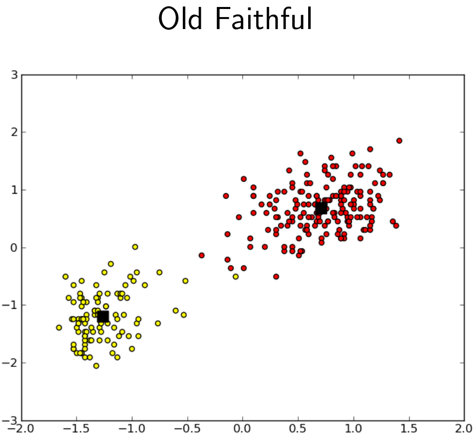
$$\frac{SSE}{\partial a} = -\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - (ax_i + b))$$

$$\frac{SSE}{\partial b} = -\sum_{i=1}^{n}(y_i - (ax_i + b))$$

Gradient descent demo



Detekce shluků (clustering)



Cíl shlukování

shlukování obecně:

- minimalizovat vzdálenosti v rámci shluku
- maximalizovat vzdálenosti mezi shluky

konkrétně např: minimalizace sum čtverců vzdáleností od středů shluků

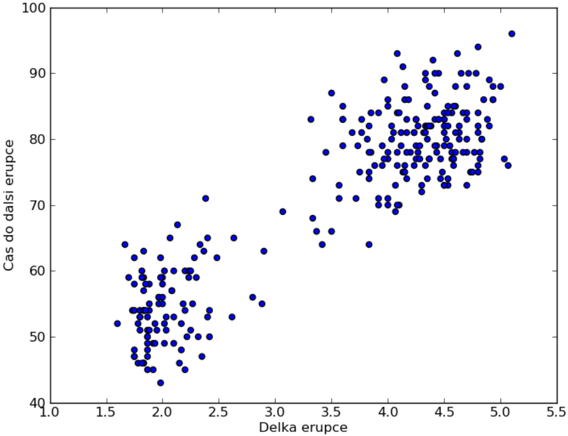
Normalizace

klíčový praktický krok: normalizace (standardizace)

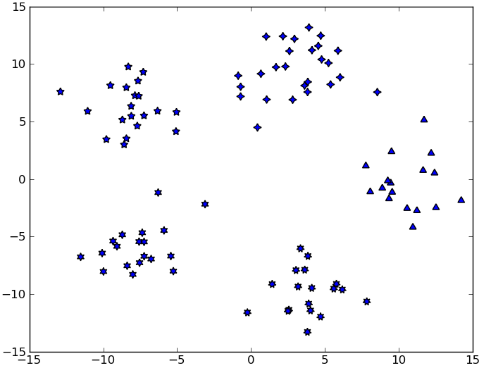
- potřebujeme data dostat na stejnou „škálu“, jinak bude dominovat jedna dimenze
- z-skóre
  - odečíst průměr
  - podělit standardní odchylkou

Význam normalizace

Old Faithful data



Detekce shluků – simulovaná data

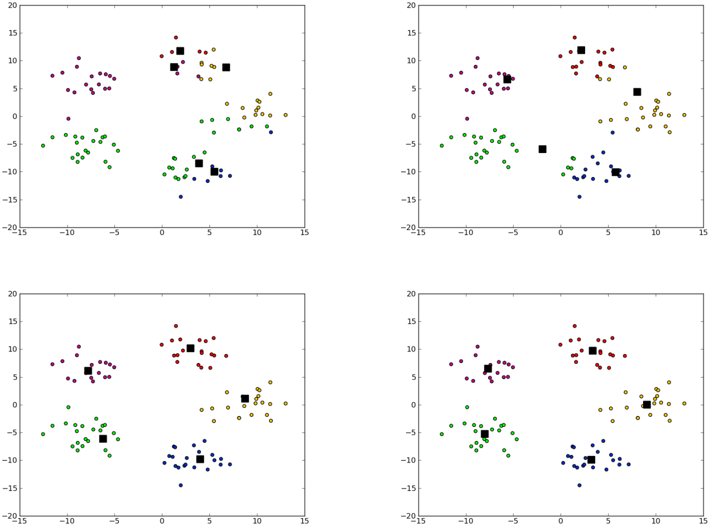


Algoritmus *k*-means

- vyber k „středů shluků"
- opakuj:
  - každý bod přiřaď do toho shluku, jehož střed je nejblíž
  - aktualizuj polohu středů – těžiště bodů přiřazených do shluku

http://www.naftaliharris.com/blog/visualizing-k-means-clustering/

Algoritmus k-means: ukázka



Algoritmus k-means – poznámky

- hladová metoda
- lokální optima
- role inicializace
- opakované spuštění